



Systèmes d'équations aux dérivées partielles pour la biologie : modèles, analyse numérique et simulations

Magali Ribot

► To cite this version:

Magali Ribot. Systèmes d'équations aux dérivées partielles pour la biologie : modèles, analyse numérique et simulations. Analyse numérique [math.NA]. Université de Nice Sophia Antipolis, 2014. tel-01095921

HAL Id: tel-01095921

<https://hal.science/tel-01095921>

Submitted on 16 Dec 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

UNIVERSITÉ DE NICE SOPHIA ANTIPOLIS

Mémoire présenté pour l'obtention d'une

HABILITATION A DIRIGER DES RECHERCHES

Spécialité : Mathématiques Appliquées

présentée et soutenue le 12 Décembre 2014

par

Magali RIBOT

**Systèmes d'équations aux dérivées partielles pour la
biologie : modèles, analyse numérique et simulations**

Devant le jury composé de :

Rémi Abgrall,	Universität Zürich,	<i>Examineur</i>
José Antonio Carrillo de la Plata,	Imperial College London,	<i>Rapporteur</i>
Claire Chainais Hillairet,	Université Lille 1,	<i>Examinatrice</i>
Stéphane Descombes,	Université Nice Sophia Antipolis,	<i>Examineur</i>
Marie Doumic Jauffret,	INRIA Paris-Rocquencourt,	<i>Rapporteur</i>
Thierry Goudon,	INRIA Sophia Antipolis,	<i>Examineur</i>
Frédéric Lagoutière,	Université Paris-Sud,	<i>Rapporteur</i>
Roberto Natalini,	IAC-CNR Roma,	<i>Invité</i>

Remerciements

Cette habilitation à diriger des recherches n'aurait pas vu le jour sans l'aide précieuse d'un grand nombre de personnes. Thierry Goudon a été le plus opiniâtre et le plus persuasif pour m'encourager à l'écrire, je l'en remercie. Merci également pour cette énergie et cette disponibilité au quotidien, dont j'ai largement profité depuis ton retour à Nice !

Pour commencer, je suis très heureuse de la composition du jury de cette HDR. Les trois rapporteurs de ce mémoire, José Antonio Carrillo, Marie Doumic et Frédéric Lagoutière, ont accepté avec enthousiasme de prendre le temps de lire le manuscrit et je leur en suis très reconnaissante ; leur avis m'a beaucoup touché. Je remercie aussi les autres membres du jury, Rémi Abgrall, Claire Chainais, Stéphane Descombes d'avoir accepté de venir à la soutenance malgré leurs nombreuses occupations. Enfin, pour clore le tour du jury, un remerciement spécial à Roberto Natalini, qui a su me guider vers de nouveaux sujets de recherche et m'encourager dans les moments difficiles !

En écrivant ces remerciements, j'ai une pensée toute particulière pour Michelle Schatzman, sans qui cette belle aventure n'aurait jamais commencé. Faire son doctorat sous sa direction a été une expérience riche d'enseignements, que je n'oublierai pas.

A ceux avec qui j'ai fait un bout de chemin scientifique, les collaborateurs d'hier et de maintenant, j'envoie de chaleureux remerciements. Parmi eux, j'adresse une mention toute particulière aux thésards que j'ai encadrés : Cristiana, Monika et Bastien, je vous souhaite à tous les trois de belles années de recherche !

Enfin, sans l'appui des collègues du Laboratoire Dieudonné et de l'équipe COFFEE de l'INRIA et sans l'aide de tout le personnel administratif, la recherche n'avancerait pas si bien ! Je remercie donc avec grand plaisir les secrétaires pour leur patience et leur soutien et tous les collègues pour les petits mots, les longues discussions (scientifiques ou non !) et les encouragements de toutes sortes.

Passons maintenant aux remerciements plus personnels. Merci à tous ceux avec qui nous avons partagé de bons moments depuis que nous sommes niçois, aux copains fidèles des 20 ans toujours présents, aux copains de randonnées, de petites ballades, de pique-nique, de salons de thé, de repas filles, de sorties et/ou d'entrées d'école et/ou de crèche et de vacances partagées !

Je voudrais aussi adresser un grand merci à mes parents, toujours et invariablement à mes côtés. Remercier Julien pour tout serait trop long, je me contente ici de le remercier pour sa présence de tous les jours. Et pour finir en beauté, j'écris ces quelques mots pour remercier mes trois enfants, Camille, Jeanne et Raphaël, pour les sourires du matin et les chagrins du soir (ou l'inverse !).

Et comme le chante le petit dernier, *Y'a du tangage, y'a du roulis, y'a des coups d'chiens et y'a des tempêtes, mais comme on n'est pas des mauviettes, de tous les métiers c'est le plus joli !*

À Camille, Jeanne et Raphaël

À Michelle



Personne
diabolique qui aime
peindre !

06/12/2024

Table des matières

Introduction	9
Liste des publications	15
I Etude mathématique de modèles hyperboliques pour le chimiotactisme	17
1 Modélisation du chimiotactisme	19
1.1 Des modèles paraboliques...	19
1.2 ... aux modèles cinétiques et hyperboliques	20
2 Un modèle semi-linéaire hyperbolique de chimiotactisme	23
2.1 Stabilité des états stationnaires constants	24
2.2 Un schéma d'ordre élevé asymptotique	28
2.3 Simulations et limites du modèle	32
Conclusion	35
3 Un modèle quasi-linéaire hyperbolique de chimiotactisme	37
Contexte biologique	38
3.1 Etude des solutions stationnaires avec vide	40
3.2 Un schéma <i>well balanced</i> de reconstruction aux interfaces	44
3.3 Simulations numériques	51
3.4 Comparaison avec un système parabolique limite	52
Conclusion	55
4 Applications des modèles de chimiotactisme	57
4.1 Modèle de chimiotactisme sur réseaux	58
4.2 Modèles de poursuite-évasion	63
Conclusion	69
5 Travaux en cours et perspectives	71
II Modèle pour la formation de biofilms	73
6 Modélisation des biofilms	75
6.1 Qu'est-ce qu'un biofilm ?	75
6.2 Différents modèles mathématiques	76

7	Modèle hydrodynamique pour la croissance de biofilms	79
	Contexte biologique	80
7.1	Modèle hydrodynamique de formation de biofilms de cyanobactéries	82
7.2	Stabilité des états stationnaires en 1D	84
7.3	Difficultés numériques	85
7.4	Choix des paramètres	87
7.5	Simulations numériques	88
	Conclusion	91
8	Travaux en cours et perspectives	93
	Bibliographie	95

Introduction

Contexte

Les travaux présentés dans ce manuscrit ont été effectués entre 2004, date à laquelle j'ai été recrutée maître de conférences au Laboratoire Dieudonné de l'Université de Nice Sophia Antipolis, et 2014. Durant cette période, j'ai développé une collaboration avec Roberto Natalini, à Rome, et ses collaborateurs proches. Nous avons co-encadré 2 thèses ensemble :

- la thèse de Cristiana Di Russo, soutenue en mars 2011 à l'Università Roma Tre, qui portait sur l'analyse des modèles multi-dimensionnels de chimiotactisme et sur la modélisation de la formation de biofilms [61], et
- la thèse de Monika Twarogowska, soutenue en février 2012 à l'Università Dell'Aquila, qui portait sur l'analyse numérique du modèle mono-dimensionnel quasi-linéaire de chimiotactisme [157].

Une partie des travaux présentés ici sont issus de ces thèses.

J'ai également développé des collaborations au Laboratoire Dieudonné avec, d'une part, Florent Berthelin et David Chiron et d'autre part, Thierry Goudon, Boniface Nkonga et Michel Rasle. Nous coencadrons également avec Thierry Goudon

- la thèse de Bastien Polizzi, débutée en septembre 2013 à l'Université de Nice Sophia Antipolis, qui porte sur l'étude numérique des modèles de trafic multi-voies, en collaboration avec Florent Berthelin et sur la modélisation de biofilms de micro-algues sur des dispositifs en mouvement, avec Olivier Bernard de l'INRIA Sophia Antipolis & Laboratoire Océanographique de Villefranche sur Mer.

D'autres collaborations, notamment interdisciplinaires, sont en cours et seront détaillées au début du chapitre 7 ou dans les perspectives des deux parties, aux chapitres 5 et 8.

Pour mener à bien ces différents travaux, je me suis investie dans le montage des différents projets suivants :

- le projet CNRS-CNR " Modélisation de la biodégradation des monuments " entre 2008 et 2009, dont j'ai été responsable du côté français, le responsable italien étant Roberto Natalini,
- le projet ANR Jeunes Chercheurs-Jeunes Chercheuses MONUMENTALG " MOdélisation mathématique et simulations NUMériques pour la dégradation biologique des MONUMENTs et pour la prolifération des ALGues " entre 2010 et 2014, dont j'ai été responsable,
- l'équipe COFFEE, INRIA Sophia Antipolis Méditerranée, dont je suis responsable permanente depuis 2011, le responsable principal étant Thierry Goudon. J'ai, entre autres, participé activement à la fondation, à la mise en place, au suivi et à l'évaluation de cette équipe INRIA,
- l'équipe EDP-Analyse Numérique du Laboratoire Dieudonné, dont je suis responsable adjointe depuis 2011, les responsables ayant été Jacques Blum jusqu'en 2013 et Roland Masson depuis.

Organisation du manuscrit

Ce manuscrit présente les travaux effectués dans deux domaines : l'étude mathématique, analytique et numérique, de modèles de chimiotactisme et l'étude de modèles pour la formation de biofilms, en utilisant des systèmes d'équations aux dérivées partielles. Ces deux sujets entrent dans un cadre commun, l'étude mathématique des diverses formes de comportement collectif qui cherche à comprendre comment des individus s'organisent et communiquent. Les exemples de tels comportements ne manquent pas dans la nature, observables à des échelles très différentes : des bancs de poissons aux essaims, des corps de fructification pluricellulaires des myxobactéries aux tourbillons de phytoplanctons. Tous ces phénomènes peuvent être modélisés par des interactions entre particules au niveau microscopique ou macroscopique. A noter que les deux phénomènes de chimiotactisme et de croissance de biofilms ne sont pas totalement déconnectés, puisque certaines bactéries comme *Escherischia Coli* ou *Pseudomonas Aeruginosa* pratiquent les deux. On citera de nombreuses études biologiques mettant en évidence l'effet du chimiotactisme sur la formation de biofilms [138, 144] ou une étude récente qui utilise des modèles de type chimiotactisme pour modéliser la formation de biofilms [68].

Les buts et les techniques employées pour mener à bien ces recherches sont communs aux deux parties : nous nous attachons à comparer les solutions des modèles mathématiques avec les résultats d'expériences menées par des biologistes. Les moyens mis en œuvre pour y parvenir sont les mêmes, à savoir l'utilisation de systèmes d'EDPs de type hyperbolique. Enfin, la procédure mise en place est identique : dans la phase d'étude mathématique, nous essayons de croiser les renseignements donnés par l'analyse et les résultats obtenus numériquement. Ainsi, les résultats analytiques trouvés nous permettent de valider les méthodes numériques employées et nous indiquent également sur quel type de méthodes se concentrer, par exemple les méthodes qui préservent les solutions stationnaires en tentant compte des termes sources ou qui préservent l'asymptotique. En retour, les simulations numériques nous donnent des pistes pour l'étude analytique du système, comme le type de solutions stationnaires avec zones de vide. Entre les deux parties, un lien naturel existe puisque nous nous basons sur des techniques similaires pour les études analytiques et numériques des modèles proposés et puisque les résultats obtenus dans une partie alimentent notre réflexion sur les modèles à utiliser dans l'autre partie. Voici quelques exemples parlants de problématiques qui se répètent au long du manuscrit :

- traitement numérique des termes sources et équilibre avec les termes de flux aux chapitres 2, 3 et 4,
- traitement numérique des zones de vide aux chapitres 3 et 7,
- comparaison des comportements entre systèmes hyperbolique et parabolique aux chapitres 2 et 3,
- classification de solutions stationnaires aux chapitres 2 et 3,
- stabilité des états stationnaires aux chapitres 2 et 7.

Plus précisément, dans la première partie, nous cherchons à répondre aux questions suivantes : est-ce qu'un modèle hyperbolique est nécessaire pour modéliser le chimiotactisme ? Présente-t-il des propriétés différentes d'un modèle parabolique, plus simple à étudier ? Et, si la réponse est oui à ces deux questions, quel modèle hyperbolique choisir ? La complexité d'un modèle non-linéaire avec des termes inertiels est elle nécessaire ? Les études présentées ici nous permettront de répondre en partie à ces questions et d'envisager des applications des modèles étudiés.

L'objectif de la deuxième partie est de proposer un modèle pour la formation de biofilms qui décrive finement l'évolution spatiale du biofilm, en montrant une vitesse de propagation finie du front. Là aussi, l'étude du modèle hyperbolique envisagé permet de valider notre approche

et nous pouvons utiliser le modèle pour tester différentes influences, comme celle de la lumière ou encore l'étendre à des situations plus compliquées, comme la formation de biofilms sur des dispositifs en mouvement. Il est à noter que la deuxième partie sur la modélisation pour la formation de biofilms est encore en plein développement et que plusieurs projets associés sont en cours, mais pas encore aboutis, ou sont en train de renaître après une phase de latence. En particulier, des comparaisons plus poussées avec des expériences sont prévues, même si les résultats présentés ici sont nés de nombreuses discussions avec des biologistes. De nombreux contacts ont d'ailleurs été noués ou repris à l'occasion d'une conférence interdisciplinaire organisée à Nice en juin 2014 et devraient permettre d'obtenir des résultats d'expérience à comparer avec notre modèle. Ce point sera détaillé au chapitre 8, consacré aux perspectives sur ce sujet.

Dans ce qui suit, on trouve quelques détails supplémentaires sur les travaux des chapitres à venir et leur positionnement par rapport aux travaux existants.

Partie 1 : Etude mathématique de modèles hyperboliques pour le chimiotactisme

Nous présentons les modèles classiques de chimiotactisme au chapitre 1 et les perspectives envisagées sur ce sujet au chapitre 5.

Un modèle semi-linéaire de chimiotactisme. Le chapitre 2 présente l'étude du modèle semi-linéaire (1.4), aussi bien au niveau théorique que numérique. Nous nous servons, en effet, des propriétés prouvées au niveau théorique pour construire des schémas numériques et, réciproquement, nous essayons d'appréhender un comportement général à l'aide de simulations numériques. Ce modèle a été dérivé à partir de modèles cinétiques [146, 85] et sa partie flux est la même que celle du système des ondes dissipatives (ou de Cattaneo ou de la chaleur hyperbolique).

Nous commençons donc l'analyse du modèle semi-linéaire par la stabilité de ses solutions stationnaires et nous prouvons au passage un résultat d'existence globale en dimension 1 pour des données initiales proches des états stationnaires constants stables [Ra7]. Ces résultats sont établis aussi bien sur \mathbb{R} tout entier que sur un intervalle borné de \mathbb{R} . Une première extension en dimension 2 est présentée ici [Ra6] et est développée dans [61]. L'étude des solutions stationnaires pour le système parabolique de Keller-Segel (1.1) a déjà été effectuée en détails dans [143] et on remarque que dans le cas d'un intervalle borné avec conditions de type "no-flux", les solutions stationnaires coïncident, mais peut-être pas la stabilité. Dans [Ra7], nous étudions donc théoriquement et numériquement la stabilité de ces solutions stationnaires pour le système hyperbolique. L'existence globale de solutions pour le système semi-linéaire a déjà été étudiée en 1D dans [97, 100, 101] mais sous des hypothèses assez restrictives de majoration des termes sources non linéaires, nous généralisons donc ces résultats en 1D et 2D sans hypothèse restrictive en utilisant des estimations fines sur le système des ondes dissipatives [20]. Nous proposons également des résultats d'existence globale sur un domaine borné de \mathbb{R} avec conditions de type "no-flux" aux bords, ce qui n'avait pas été étudié à notre connaissance. Quant au 2D, jusqu'alors, l'étude était surtout numérique [64].

Enfin, un schéma de type *Asymptotic High Order* est introduit afin d'approcher correctement les solutions stationnaires, constantes et non constantes et des conditions aux bords discrètes adaptées sont calculées dans le cas des conditions aux limites de type "no-flux" [Ra5]. En effet, nous avons mis en évidence la difficulté de stabiliser le flux numérique (qui doit être nul asymptotiquement, au vu de la théorie) par un simple schéma upwind car les solutions stationnaires non constantes sont très concentrées à l'origine. Il est donc nécessaire d'introduire des méthodes adaptées au calcul précis des solutions stationnaires, en équilibrant le flux et le terme source. En s'inspirant des schémas de type *Asymptotic High Order* [5] pour des systèmes

hyperboliques dissipatifs qui proposent un traitement efficace du terme source, nous les avons améliorés sur deux points : ajout d'un terme source et calcul de conditions aux bords discrètes adaptées à la conservation de la masse. À noter que ces schémas ne nécessitent aucune expression exacte des solutions stationnaires, contrairement à certaines méthodes de type *well balanced*. Ces résultats ont été ensuite retrouvés dans [82, 83] par des méthodes de type *well balanced*, qui donnent des résultats tout à fait comparables. Les limites du modèle sont également présentées, en particulier l'explosion des solutions en 1D pour des masses assez élevées car le système ne conserve pas la positivité des densités.

Un modèle quasi-linéaire de chimiotactisme. Au chapitre 3, nous adoptons la même démarche qu'au chapitre précédent, à savoir associer des résultats théoriques et numériques en parallèle. Le modèle (1.5) que l'on considère à présent a été introduit afin de modéliser la formation de vaisseaux sanguins dans [147] et sa partie flux correspond au système d'Euler isentropique. Il a été utilisé pour effectuer des simulations numériques [38], mais a été peu étudié théoriquement [62, 61].

Comme précédemment, nous étudions pour commencer les solutions stationnaires du système en 1D et nous nous intéressons particulièrement aux solutions stationnaires contenant une zone de vide, où la densité est nulle. De nombreux résultats d'existence de solutions stationnaires avec vide d'énergie minimale en dimension quelconque pour les étoiles gazeuses sont présents dans la littérature [140] et restent valables dans ce contexte, car les modèles employés dans les deux domaines, modélisation de la vasculogénèse et des étoiles gazeuses, sont extrêmement proches. Cependant, grâce à des simulations numériques, nous observons asymptotiquement toute une zoologie de solutions stationnaires avec une ou plusieurs zones de vide, d'énergie minimale ou non. Dans [Rs1], nous arrivons à classifier entièrement en 1D ces solutions que ce soit sur \mathbb{R} tout entier ou sur un intervalle borné de \mathbb{R} et, à notre connaissance, il n'existait pas jusqu'alors de classification complète de ce type sur un intervalle borné. De plus, nous ordonnons l'infinité de solutions obtenues en fonction de leur énergie. Il est à noter que dans le cas de \mathbb{R} tout entier l'existence et l'unicité de telles solutions stationnaires avaient déjà été prouvées dans [11, 29] à l'aide d'une technique différente de la nôtre : les solutions ne sont pas construites explicitement et sont cherchées comme minimiseurs d'une énergie bien choisie.

En revanche, l'étude de la stabilité de telles solutions ne peut se faire que numériquement. On a besoin pour cela d'un schéma encore une fois adapté autour des solutions stationnaires. Le caractère non linéaire des équations fait que l'on est amené à utiliser une technique de type reconstruction aux interfaces, en s'inspirant pour le traitement de la source de [9], qui étudie les équations de St Venant¹, et de [26], qui traite le système d'Euler compressible mais sans chimiotactisme. La technique se rapproche de [78], mais nous avons à considérer en plus le traitement numérique du vide par des solveurs adaptés, car le terme de pression que l'on considère est non linéaire [Ra1]. Les résultats numériques obtenus dans [14] par une méthode de type solveur de Riemann modifié coïncident avec les nôtres.

Enfin, en vue d'établir une comparaison entre modèle parabolique et modèle hyperbolique, nous considérons la limite temps long-forte friction du système, comme établi dans [119] sans chimiotactisme ou dans [58]. Ces deux articles se placent sur \mathbb{R} entier, alors qu'ici, nous nous plaçons sur un intervalle borné, et aucune dilatation d'espace ne peut être prise en compte. Nous montrons alors dans [Ra2] une propriété *asymptotic preserving* du schéma dans l'esprit de [26] pour le cas sans chimiotactisme. Construire un schéma *asymptotic preserving* est une tâche délicate [40, 39, 16]. Ici, nous obtenons un premier résultat surprenant, à savoir que le choix de la reconstruction utilisée est essentiel pour garantir la propriété *asymptotic preserving*. En utilisant le schéma mis au point, nous étudions les comportements en temps long des systèmes hyperbolique et parabolique et nous observons numériquement des différences entre les états

1. avec des solutions stationnaires connues explicitement

asymptotiques de ces deux systèmes, contrairement au cas semi-linéaire.

Applications des modèles de chimiotactisme. Le chapitre 4 est composé de deux applications distinctes du chimiotactisme. Nous commençons par présenter l'étude du modèle semi-linéaire (1.4) sur un graphe, qui correspond aux articles [Ra3] et [Rp1] et qui cherche à reproduire le déplacement des fibroblastes sur un réseau de fibres via le chimiotactisme. Le mouvement des fibroblastes sur chaque arc est décrit par le modèle hyperbolique semi-linéaire (1.4) de chimiotactisme 1D étudié au chapitre 2. A noter que la dimension 1 est particulièrement adaptée à l'étude décrite ici. Nous proposons alors un modèle complet, en précisant les conditions de transmission aux nœuds. Nous proposons également un schéma numérique d'ordre élevé asymptotique, en s'inspirant du schéma calculé pour un intervalle à la section 2.2, afin d'effectuer des simulations.

L'étude de lois de conservation ou de l'équation des ondes sur un réseau a déjà été considérée, par exemple dans [81] pour le trafic routier, ou dans [55, 159] pour des cordes flexibles distribuées le long d'un graphe planaire. Cependant, cette étude est une des deux premières des équations du chimiotactisme sur un réseau ; la 2^e a été développée en même temps que la nôtre et indépendamment dans [23] et concerne le modèle parabolique 1D de Keller-Segel sur un réseau. A noter que dans un but applicatif similaire, un modèle cinétique 3D de mouvements de cellules sur une matrice extra-cellulaire a été proposé dans [43] et que notre modèle peut être vu comme une réduction 1D à un réseau de ce modèle 3D. De plus, les conditions de transmission employées sont en elles-mêmes originales dans ce contexte, car la plupart des modèles d'EDPs, comme celui de [23], utilisent la continuité des densités aux nœuds, alors que nous proposons ici d'imposer la continuité des flux. Enfin, c'est, à notre connaissance, une des premières études de schéma préservant les solutions stationnaires adapté à un réseau.

La deuxième partie du chapitre est consacrée à des modèles de poursuite-évasion, en prenant comme brique de base les modèles de chimiotactisme usuels [Rs3]. Nous considérons deux populations distinctes en interaction, une de proies et l'autre de prédateurs, réagissant selon un principe d'attraction-répulsion. Nous négligeons les interactions à l'intérieur des populations et nous proposons des modèles de chimiotactisme couplés en lien avec les modèles d'EDO sous-jacents. Il est intéressant de noter que le phénomène d'explosion pour le modèle de Keller-Segel n'est pas présent dans ce cas, comme le montre un résultat d'existence globale et d'unicité de solutions pour le système étudié.

Des modèles de poursuite-évasion ont été déjà proposés dans le contexte de modèles de jeux de poursuite-évasion liés à l'équation d'Hamilton-Jacobi [10, 110] ou d'équations paraboliques couplées dans [150, 149, 148, 13] pour reproduire la formation de " hotspots " de l'activité criminelle. Les deux articles [73, 158] étudient des modèles relativement proches du nôtre mais avec une définition des mécanismes d'attraction-répulsion différente et le but de leur étude est assez éloigné : recherche de solutions stationnaires et de leur stabilité. On remarque que la littérature concernant différentes populations en interaction est assez étendue [72, 99, 117], en comparaison des résultats concernant des espèces en compétition. Dans [59], les auteurs s'intéressent à un cadre commun à ces deux situations et montrent des résultats d'existence de solutions mesures faibles et d'unicité dans le cas de potentiels réguliers, en utilisant des techniques différentes dans les deux cas.

Partie 2 : Modèle pour la formation de biofilms

On présente les modèles classiques de formation de biofilms au chapitre 6 et les perspectives des travaux qui suivent au chapitre 8.

Modélisation de biofilms. Au chapitre 7, nous proposons un nouveau modèle multidimensionnel pour la formation de biofilms, appliqué au cas particulier de cyanobactéries se

développant au fond de fontaines. Un biofilm se développe en présence d'eau et au contact d'une surface et les cyanobactéries produisent une matrice polymérique extra-cellulaire, appelée EPS. Les cyanobactéries sur lesquelles nous nous concentrons sont du type *Chroococcales Gloeocapsa* et se servent de la photosynthèse pour obtenir de l'énergie, elles sont donc sensibles à l'intensité lumineuse qu'elles reçoivent. Nous souhaitons développer un modèle qui décrivent les déplacements mécaniques du biofilm et la dépendance en l'espace, tout en tenant compte des propriétés biologiques des micro-algues étudiées.

L'intérêt croissant pour les biofilms a entraîné l'étude de nombreux modèles mathématiques pour les décrire. Une première catégorie de tels modèles sont les modèles " discrets " multi-agents [122] de type automates cellulaires où chaque organisme est décrit individuellement. Une autre approche que ces modèles, très coûteux, est l'utilisation de modèles de type EDPs [109]. L'utilisation d'un modèle de type multi-phase est une autre possibilité, plutôt que de décrire une frontière entre le biofilm et le milieu à l'aide de techniques de mouvements de fronts [1], où le déplacement du front doit être modélisé par une loi physique, ce qui n'est pas évident. Notre modèle est dans la même veine que le modèle bi-phase décrit dans [165, 166] et qui traite en particulier l'effet du détachement dû à un flux externe. Enfin, notre modèle généralise le modèle mono-dimensionnel proposé dans [4] pour décrire l'effet du quorum sensing dans le cas de la bactérie *Pseudomonas aeruginosa*; ce dernier modèle est nettement simplifié sur la description des vitesses par rapport au nôtre et il est limité, de ce fait, à la dimension 1.

Le modèle que nous étudions est un modèle de type multi-phase, basé sur la théorie des mélanges [139, 8]. La première originalité est que, dans le système final, nous gardons les termes inertiels dans les équations sur les vitesses, afin d'observer une vitesse finie de propagation du front [Ra4, Rp2]. La deuxième est que nous incorporons aussi dans les équations une modélisation de la dépendance en la lumière via le coefficient de croissance des cyanobactéries. Les paramètres du modèle sont estimés grâce à la littérature biologique et les expériences sur le sujet. Une fois le modèle établi, nous étudions la stabilité des solutions stationnaires constantes à vitesse nulle. De plus, le modèle présente des difficultés numériques liées notamment aux possibles apparitions et disparitions de phases. Nous proposons des solutions pour ces difficultés et nous présentons des simulations numériques. Ces simulations nous permettent également d'étudier l'influence des valeurs des paramètres choisis sur les résultats obtenus grâce à une analyse de sensibilité numérique [Rs2].

Liste des publications

Travaux en lien avec ce mémoire

Prépublications et articles soumis :

- [Rs1] F. Berthelin, D. Chiron, and M. Ribot. Stationary solutions with vacuum for a one-dimensional chemotaxis model with non-linear pressure. En révision, 2014.
- [Rs2] F. Clarelli, C. Di Russo, R. Natalini, and M. Ribot. A fluid dynamics multidimensional model of biofilm growth : stability, influence of environment, and sensitivity. En révision, 2014.
- [Rs3] T. Goudon, B. Nkonga, M. Rascle, and M. Ribot. Self-organized populations interacting under pursuit-evasion dynamics. En révision, 2014.

Articles parus dans des revues internationales à comité de lecture :

- [Ra1] R. Natalini, M. Ribot, and M. Twarogowska. A well-balanced numerical scheme for a one dimensional quasilinear hyperbolic model of chemotaxis. *Commun. Math. Sci.*, 12(1) :13–39, 2014.
- [Ra2] R. Natalini, M. Ribot, and M. Twarogowska. A numerical comparison between degenerate parabolic and quasilinear hyperbolic models of cell movements under chemotaxis. *J. Sci. Comput.*, 2014. Accepté.
- [Ra3] G. Bretti, R. Natalini, and M. Ribot. A hyperbolic model of chemotaxis on a network : a numerical study. *ESAIM Math. Model. Numer. Anal.*, 48(1) :231–258, 2014.
- [Ra4] F. Clarelli, C. Di Russo, R. Natalini, and M. Ribot. A fluid dynamics model of the growth of phototrophic biofilms. *J. Math. Biol.*, 66(7) :1387–1408, 2013.
- [Ra5] R. Natalini and M. Ribot. An asymptotic high order mass-preserving scheme for a hyperbolic model of chemotaxis. *SIAM J. Num. Anal.*, 50(2) :883–905, 2012.
- [Ra6] C. Di Russo, R. Natalini, and M. Ribot. Global existence of smooth solutions to a two-dimensional hyperbolic model of chemotaxis. *Commun. Appl. Ind. Math.*, 1(1) :92–109, 2010.
- [Ra7] F. R. Guarguaglini, C. Mascia, R. Natalini, and M. Ribot. Stability of constant states of qualitative behavior of solutions to a one dimensional hyperbolic model of chemotaxis. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 12(1) :39–76, 2009.

Proceedings avec processus de révision :

- [Rp1] G. Bretti, R. Natalini, and M. Ribot. A numerical scheme for a hyperbolic relaxation model on networks. In *AIP Conference Proceedings-American Institute of Physics*, pages 1389 – 1412, 2011.
- [Rp2] F. Clarelli, C. Di Russo, R. Natalini, and M. Ribot. Mathematical models for biofilms on the surface of monuments. In *Applied and industrial mathematics in Italy III*, volume 82 of *Ser. Adv. Math. Appl. Sci.*, pages 220–231. World Sci. Publ., Hackensack, NJ, 2010.

Travaux issus de la thèse

Articles parus dans des revues internationales à comité de lecture :

- [RaTh1] M. Ribot and M. Schatzman. Stability, convergence and order of the extrapolations of the residual smoothing scheme in energy norm. *Confluentes Math.*, 3(3) :495–521, 2011.
- [RaTh2] M. Ribot. Asymptotics of some ultra-spherical polynomials and their extrema. *Methods Appl. Anal.*, 12(1) :43–74, 2005.
- [RaTh3] P-H. Chavanis, M. Ribot, C. Rosier, and C. Sire. On the analogy between self-gravitating Brownian particles and bacterial populations. In *Nonlocal elliptic and parabolic problems*, volume 66 of *Banach Center Publ.*, pages 103–126. Polish Acad. Sci., Warsaw, 2004.
- [RaTh4] S. Descombes and M. Ribot. Convergence of the Peaceman-Rachford approximation for reaction-diffusion systems. *Numer. Math.*, 95(3) :503–525, 2003.

Proceedings avec processus de révision :

- [RpTh1] M Ribot and M Schatzman. Equivalence between the spectral and the finite elements matrices. In *Computational Fluid and Solid Mechanics, Proc. of the Second MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics*, pages 17–20, 2003.
- [RpTh2] M. Ribot and M. Schatzman. Développement asymptotique des zéros des polynômes ultra-sphériques et application au préconditionnement des méthodes spectrales : cas des dimensions 1 et 2. In *Actes de congrès CANUM 2003*, 2003.

Thèse

- [Th1] M. Ribot. *Etude théorique de schémas numériques pour les systèmes de réaction-diffusion ; application à des équations paraboliques non linéaires et non locales*. PhD thesis, Université Claude Bernard Lyon 1, 2003.

Chapitre dans un livre d'enseignement

- [L1] M. Ribot. *Méthodes numériques appliquées pour le scientifique et l'ingénieur : Edition 2013. Chapitre Equations aux dérivées partielles*. Jean-Philippe Grivet, EDP sciences, 2013.

Première partie

Etude mathématique de modèles hyperboliques pour le chimiotactisme

Chapitre 1

Modélisation du chimiotactisme

Le mouvement de cellules, bactéries ou autres micro-organismes sous l'effet d'un signal chimique, représenté par le gradient d'une concentration de chimioattractant, a été largement étudié en mathématiques ces dernières années. Commençons par quelques exemples concrets bien connus en biologie.

Un premier exemple d'organisme se déplaçant sous l'effet d'un chimioattractant est une bactérie, *Escherichia coli*, munie d'un flagelle qui alterne des phases de parcours en ligne droite, appelées "run", et des phases de rotation, appelées "tumble". Dans un milieu homogène, le déplacement de ces bactéries peut être modélisé par une diffusion, liée à la marche aléatoire qu'elles effectuent. Si ces bactéries sentent des fluctuations du milieu où elles évoluent, la marche aléatoire est biaisée et les phases de "run" s'allongent ou raccourcissent. Ces fluctuations du milieu peuvent être dues à la variation d'une concentration chimique.

Un deuxième exemple d'organisme utilisant le chimiotactisme est une amibe, *Dictyostelium discoideum*, aussi appelée Dicty. Cette amibe, dans des conditions de carence nutritionnelle, émet un chimioattractant, le AMPc, qui attire les amibes des alentours. Après cette phase d'agrégation, les amibes forment un pseudo-plasmode et vivent en société.

Citons également le phénomène de vasculogénèse, c'est-à-dire la première étape de formation de vaisseaux sanguins par les cellules endothéliales via l'émission d'un chimioattractant, le VEGF-A. Des expériences *in vitro* effectuées par l'équipe de Serini [147] à l'aide de cellules endothéliales montrent que des réseaux vascularisés ne se développent que si la densité initiale de cellules est comprise entre deux valeurs seuils. Une revue de modèles pour la vasculogénèse et l'angiogénèse se trouve dans [145].

De nombreux modèles ont été proposés et étudiés pour décrire ce phénomène de chimiotactisme. On peut consulter à ce sujet, par exemple, les livres et revues suivants : [98, 99, 133, 123, 95]. Ces modèles sont identiques à ceux développés pour les systèmes auto-gravitants de particules [42] avec l'analogie suivante [RaTh3] : la concentration de chimioattractant est vue comme un potentiel, attractif ou répulsif et est obtenue via l'équation de Poisson ou, plus généralement, par convolution avec la densité.

1.1 Des modèles paraboliques...

Le modèle le plus considéré est le système de Patlak-Keller-Segel [108, 131], où l'évolution de la densité de cellules ρ est décrite par une équation parabolique et la concentration de chimioattractant ϕ est donnée par une équation parabolique ou elliptique, selon le régime considéré. Le système s'écrit :

$$\begin{cases} \partial_t \rho = \nabla \cdot (\kappa \nabla \rho - \chi \rho \nabla \phi), \\ \delta \partial_t \phi = D \Delta \phi + a \rho - b \phi, \end{cases} \quad (1.1)$$

où κ, χ, D, a et b sont des paramètres strictement positifs. Dans la première équation, le terme $\kappa \Delta \rho$ est un terme de diffusion des cellules avec κ le coefficient de diffusion, alors que le terme $\chi \nabla \cdot (\rho \nabla \phi)$ est un terme d'advection des cellules le long du gradient de concentration du chimioattractant avec un coefficient de réponse χ . La deuxième équation décrit l'évolution de la concentration de chimioattractant, elle se compose d'un terme de diffusion $D \Delta \phi$ avec un coefficient de diffusion D et d'un terme de réaction $a\rho - b\phi$ qui traduit le fait que le chimioattractant est produit par les cellules elles-mêmes. Le coefficient δ vaut $\delta = 0$ dans le cas d'un système parabolique-elliptique et $\delta = 1$ dans le cas d'un système parabolique-parabolique.

Le comportement du système (1.1) avec $\delta = 0$ est bien connu à présent : en dimension 1, la solution reste toujours globale en temps [124, 127], tandis qu'en dimensions supérieures, la solution existe globalement en temps ou explose selon la "taille" de la donnée initiale [22, 67, 89, 102]. Ces deux types de comportements s'expliquent par la compétition entre les deux termes de l'équation sur ρ : le terme d'advection tend à concentrer les cellules, au contraire du terme de diffusion. Lorsque l'advection est plus forte, on obtient une forte agrégation et une explosion en temps fini de la solution. Le système parabolique-parabolique (avec $\delta = 1$) est plus complexe à étudier au niveau analytique [32, 33]. On note deux résultats très récents et inattendus : dans [48], les auteurs mettent en évidence un phénomène de blow-up en 1D avec un coefficient de diffusion non-linéaire approprié ; dans [21], les auteurs montrent l'existence globale en temps de solutions dans le cas parabolique-parabolique pour des données grandes en dimension 2 d'espace.

Pour l'étude des solutions stationnaires du système (1.1) et de ses variantes avec des coefficients χ non linéaires, on consultera [143]. Enfin, du point de vue numérique, une première méthode aux différences finies est proposée dans [142], une méthode d'éléments finis mixtes dans [121] et un cadre général de méthodes aux volumes finis est analysé dans [76].

D'un point de vue biologique, l'explosion des densités de cellules ne semble pas être un phénomène physique acceptable et on cherche donc à limiter les fortes concentrations produites pour observer la création de motifs ou de structures permanentes. Des modifications du modèle de Keller-Segel ont donc été proposées en conséquence, détaillées dans [95, 133], par exemple en considérant l'effet "volume-filling" [94, 130]. On est alors capable de prouver l'existence globale, même en dimensions supérieures à 1 [35, 12]. Une autre possibilité est d'introduire une pression non-linéaire qui traduit le fait que les cellules ne se recouvrent pas à cause de leur volume non nul [111, 31]. On obtient alors le modèle de Keller-Segel modifié :

$$\begin{cases} \partial_t \rho = \nabla \cdot (\nabla p(\rho) - \chi \rho \nabla \phi), \\ \delta \partial_t \phi = D \Delta \phi + a\rho - b\phi, \end{cases} \quad (1.2)$$

où p une fonction phénoménologique et dépendant de la densité, que l'on peut choisir égale à la loi de pression pour les gaz isentropiques :

$$p(\rho) = \kappa \rho^\gamma, \quad \gamma > 1, \quad \kappa > 0. \quad (1.3)$$

On mentionne d'autres travaux utilisant un potentiel général et la structure flot-gradient du système étudié [11, 29, 30, 37] ; certains de ces travaux traitent de résultats d'existence ou de blow-up dans le cas de potentiels singuliers, de type Newtonien ou non [17, 19, 18].

1.2 ... aux modèles cinétiques et hyperboliques

A part les variantes hyperboliques [134, 57] de (1.1), des modèles de type cinétique, avec un niveau de description plus fin, ont été introduits, analysés et leurs limites vers des modèles macroscopiques ont été prouvées [146, 85, 153, 77, 65, 41, 133, 128, 27, 28]. Des arguments

similaires ont été utilisés dans le domaine des systèmes auto-gravitants [84, 137]. Les aspects numériques de ces systèmes cinétiques sont étudiés, par exemple dans [36, 161, 79].

Dans [146, 85, 128, 93], la limite obtenue est le modèle hyperbolique semi-linéaire suivant :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot v = 0, \\ \partial_t v + \lambda^2 \nabla \rho = \chi \rho \nabla \phi - \alpha v, \\ \delta \partial_t \phi = D \Delta \phi + a \rho - b \phi, \end{cases} \quad (1.4)$$

basé sur l'équation des ondes dissipatives (également appelée équation de la chaleur hyperbolique ou équation du télégraphe ou équation de Cattaneo ou modèle P_1). L'inconnue supplémentaire par rapport au système (1.1) est le flux moyen v des cellules. Ce système est étudié au niveau analytique dans [Ra7, 91, 96, 97, 100, 101] et numériquement dans [Ra5, Ra3, 82, 83] dans le cas mono-dimensionnel. Le cas de systèmes hyperboliques multi-dimensionnels est considéré dans [Ra6, 77, 64, 92], essentiellement du point de vue numérique et dans [61, Ra6] au niveau analytique.

Enfin, un modèle hyperbolique quasi-linéaire est introduit pour modéliser les expériences de vasculogénèse [147, 112] :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \\ \partial_t (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla p(\rho) = \chi \rho \nabla \phi - \alpha \rho u, \\ \delta \partial_t \phi = D \Delta \phi + a \rho - b \phi, \end{cases} \quad (1.5)$$

basé sur l'équation d'Euler pour les gaz compressibles avec une pression du type (1.3). Ici, la fonction ρu est le moment des cellules et le coefficient α est un coefficient de friction avec le milieu. Le système (1.4) peut être vu comme une linéarisation autour de $u = 0$ du système (1.5), en posant $v = \rho u$. Ce système a été analysé dans [61, 62] et étudié numériquement dans [Ra1, Ra2, 14] et également dans [78] pour le cas particulier $\gamma = 1$. On notera aussi que des simulations numériques multi-dimensionnelles ont été présentées dans [3, 38].

Cependant, les solutions de ce système pour $\gamma > 1$ présentent des apparitions de zones de vide au cours du temps, qui rendent les études théorique et numérique difficiles ; des résultats analytiques pour un système similaire d'Euler-Poisson, sans terme de chimiotactisme, se trouvent dans [103, 104, 86]. Une classification complète des états stationnaires avec vide dans le cas 1D sur domaine non borné ou borné est décrite dans [Rs1] et leur stabilité est étudiée numériquement ; ces états sont intéressants d'un point de vue biologique car ils correspondent à la formation de capillaires sanguins. L'existence et l'unicité de ces solutions stationnaires dans le cas de \mathbb{R} entier ont déjà été étudiées dans [11, 29]. Ces solutions stationnaires et leur apparition au cours du temps se rapprochent des solutions plateaux observées dans [94, 136, 66] pour le système (1.1) avec une diffusion constante et une fonction de chimiosensitivité χ non linéaire, dépendant de ρ . Dans le cas des systèmes auto-gravitants de particules, et en particulier de la description des étoiles gazeuses polytropiques, les états stationnaires multi-dimensionnels avec vide d'énergie minimale sont étudiés dans de nombreux articles, par exemple [56, 140].

Enfin, on remarque que dans le cas d'un intervalle borné, les systèmes hyperboliques (1.5) et (1.4) avec des conditions aux bords de type "no-flux" ont les mêmes solutions stationnaires que le système parabolique (1.1) avec des conditions aux bords de type Neumann, mais que leur stabilité n'est pas forcément identique. Le lien entre les modèles paraboliques de la section 1.1 et les modèles hyperboliques de la section 1.2 ne s'arrête pas là. Ces deux types de modèles peuvent être dérivés à partir du même modèle cinétique avec des échelles différentes [77], et le modèle parabolique-elliptique (1.2) avec $\delta = 0$ peut-être vu comme la limite temps long-forte friction du système hyperbolique (1.5), cf [58] (ou [119] sans chimiotactisme). Dans [Ra2], cette limite est étudiée numériquement après avoir identifié un schéma de type *asymptotic preserving* cohérent avec cette limite ; on y voit que les états asymptotiques sont des solutions stationnaires différentes pour les deux systèmes (1.5) et (1.2).

Chapitre 2

Un modèle semi-linéaire hyperbolique de chimiotactisme

Sommaire

2.1	Stabilité des états stationnaires constants	24
2.1.1	Solutions stationnaires et diagramme de bifurcation	25
2.1.2	Stabilité des solutions stationnaires constantes sur $[0, L]$	26
2.1.3	Stabilité de la solution stationnaire nulle sur \mathbb{R}	27
2.2	Un schéma d'ordre élevé asymptotique	28
2.2.1	Schéma <i>Asymptotic High Order</i> pour un système avec source	29
2.2.2	Calcul des conditions aux bords	30
2.2.3	Deux exemples de schémas AHO.	31
2.2.4	Propriétés du schéma	31
2.3	Simulations et limites du modèle	32
2.3.1	Résultats numériques	32
2.3.2	Limites du modèle	34
	Conclusion	35

Dans ce chapitre, nous étudions le modèle suivant introduit dans [146, 85] pour décrire le phénomène de chimiotactisme :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x v = 0, \\ \partial_t v + \lambda^2 \partial_x \rho = \chi \rho \partial_x \phi - \alpha v, \\ \partial_t \phi - D \partial_{xx} \phi = a \rho - b \phi, \end{cases} \quad (2.1)$$

avec les conditions aux bords :

$$v(0, \cdot) = v(L, \cdot) = 0, \quad \partial_x \phi(0, \cdot) = \partial_x \phi(L, \cdot) = 0. \quad (2.2)$$

Les inconnues sont la densité $\rho(x, t)$, le flux $v(x, t)$ et la concentration $\phi(x, t)$ avec $x \in \Omega \subset \mathbb{R}$ et $t > 0$.

Avec ces conditions aux bords, la masse totale est conservée, c'est-à-dire :

$$I(t) = \int_{[0, L]} \rho(x, t) dx = I(0) = \int_{[0, L]} \rho(x, 0) dx \quad (2.3)$$

et nous nous attacherons à retrouver cette propriété au niveau numérique. Nous cherchons à comparer ce système avec le système de Keller-Segel que nous rappelons ici en 1D :

$$\begin{cases} \partial_t \rho = \partial_x (\kappa \partial_x \rho - \chi \rho \partial_x \phi), \\ \partial_t \phi = D \partial_{xx} \phi + a \rho - b \phi, \end{cases} \quad (2.4)$$

avec des conditions aux bords de Neumann :

$$\partial_x \rho(0, \cdot) = \partial_x \rho(L, \cdot) = 0, \quad \partial_x \phi(0, \cdot) = \partial_x \phi(L, \cdot) = 0. \quad (2.5)$$

Pour cela, nous commençons par décrire les solutions stationnaires du système (2.1)-(2.2) qui sont communes avec celles de (2.4)-(2.5). Les solutions stationnaires sont alors telles que $v = 0$ et il existe des solutions constantes et des solutions non homogènes en espace. Nous étudions la stabilité des solutions stationnaires constantes, aussi bien dans le cas du domaine $[0, L]$ que de \mathbb{R} tout entier. La stabilité des solutions stationnaires non constantes n'est pas évidente et nous l'étudions donc numériquement. Nous remarquons qu'un schéma naïf ne donne pas un flux v nul asymptotiquement comme il le devrait et nous introduisons alors un schéma d'ordre élevé asymptotique, qui est précis pour les solutions stationnaires, ce qui règle le problème. Enfin, nous mettons en avant les limites de ce modèle, c'est-à-dire que la densité ne reste pas forcément positive au cours du temps.

Ce chapitre correspond aux articles [Ra7], [Ra6] et [Ra5].

2.1 Stabilité des états stationnaires constants

Dans cette section, nous commençons par décrire les solutions stationnaires du système (2.1)-(2.2), qui forme un diagramme de bifurcation, cf figure 2.1, avec en abscisse la masse (2.3) de la solution stationnaire : pour une masse faible, seule une solution stationnaire constante existe. Nous montrons grâce à des estimations précises, qui couplent des estimations pour la partie hyperbolique et d'autres pour la partie parabolique, que ces solutions stationnaires constantes sont stables en dessous de la première branche de bifurcation. Ces résultats sont tirés de l'article [Ra7] et une extension en 2D est également présentée dans [Ra6]. Pour des masses plus grandes, des solutions non constantes existent mais l'étude de leur stabilité se fera plus loin et numériquement.

2.1.1 Solutions stationnaires et diagramme de bifurcation

Le but de cette section est de décrire l'ensemble des solutions stationnaires du système (2.1) sur l'intervalle $[0, L]$ avec les conditions aux bords (2.2). A l'aide de ces conditions aux bords et de la première équation du système (2.1), on en déduit que le moment v est nul et que le système se réduit au système suivant :

$$\begin{cases} \lambda^2 \partial_x \rho =, \rho \partial_x \phi \\ -D \partial_{xx} \phi = a\rho - b\phi, \end{cases}$$

qui coïncide avec les solutions stationnaires du système parabolique de Keller-Segel avec les conditions aux bords de Neumann (2.5). Une description précise de telles solutions, constantes et non constantes, se trouve dans [143]. On les dessine sur le même graphe 2.1 avec comme coordonnées $(\int_0^L \rho(x) dx, \phi(0))$. Les solutions stationnaires constantes sont représentées par la droite d'équation $ax - by = 0$. En particulier, pour tout $k \in \mathbb{N}^*$, il existe une branche de

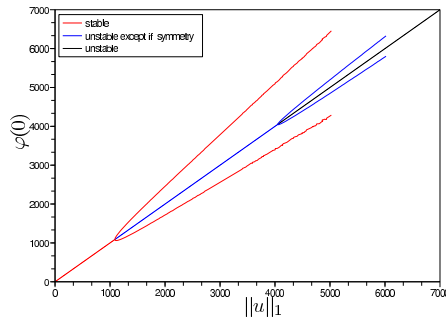


FIGURE 2.1 – Diagramme de bifurcation dans le cas $a = b = D = 1$ et $\lambda = 10$ sur $[0, 1]$.

bifurcation \mathcal{B}_k de solutions stationnaires non constantes qui part de la solution stationnaire constante correspondant à $\Phi_k = \frac{\lambda^2}{a} \left(D \frac{k^2 \pi^2}{L^2} + b \right)$. Les dérivées des deux solutions u et ϕ de la branche \mathcal{B}_k s'annulent exactement $k + 1$ fois sur $[0, L]$ [143].

Nous nous intéressons maintenant à la stabilité de ces solutions stationnaires en considérant des perturbations de masse nulle en cohérence avec la propriété (2.3). Dans le cas parabolique, des techniques classiques, comme le théorème de Crandall-Rabinowitz, permettent d'étudier la stabilité des états stationnaires homogènes et des états stationnaires non homogènes au voisinage des points de bifurcation. Ceci est détaillé dans [143]. On montre alors que, pour l'équation de Keller-Segel (2.4), les constantes sont stables avant le premier point de bifurcation et la première branche de bifurcation \mathcal{B}_1 est stable si et seulement si $b < 2\pi^2/L^2$.

Dans le cas du système hyperbolique (2.1), on se concentre sur la stabilité des solutions stationnaires constantes, en l'absence de techniques similaires au cas parabolique pour étudier la stabilité des états stationnaires non homogènes au voisinage des points de bifurcation. On montre aussi numériquement plus loin que pour le système hyperbolique, comme pour le système parabolique, la branche \mathcal{B}_1 est stable et que la deuxième branche \mathcal{B}_2 est instable, sauf si la donnée initiale est symétrique.

2.1.2 Stabilité des solutions stationnaires constantes sur $[0, L]$

Les résultats suivants de stabilité des solutions stationnaires constantes sont vrais dans le cas d'un système plus général que le système (2.1), à savoir :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x v = 0, \\ \partial_t v + \lambda^2 \partial_x \rho = g(\phi, \partial_x \phi) \rho - h(\phi, \partial_x \phi) v, \\ \partial_t \phi - D \partial_{xx} \phi = f(\rho, \phi). \end{cases} \quad (2.6)$$

On fait les hypothèses suivantes sur les fonctions f , g et h :

(H_f) $f \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^2)$ et $a = \partial_\rho f(0, 0) > 0$, $b = -\partial_\phi f(0, 0) > 0$;

(H_g) $g \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^2)$ et $g(0, 0) = 0$;

(H_h) $h \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^2)$ et $\alpha = h(0, 0) > 0$.

On considère les conditions initiales avec les hypothèses de régularité :

$$\rho_0, v_0 \in L^\infty(\mathbb{R}) \cap L^1(\mathbb{R}), \quad \phi_0 \in W^{1,\infty}(\mathbb{R}) \cap L^2(\mathbb{R}).$$

Pour étudier la stabilité des solutions stationnaires, dans [Ra7], nous commençons par étudier les valeurs propres du linéarisé autour de la solution stationnaire constante (ρ^*, ϕ^*) , en utilisant le critère de Routh-Hurwitz. On trouve alors qu'il y a stabilité si et seulement si pour tout $k \in \mathbb{N}^*$

$$\rho^* < \frac{\gamma^2(b + Dk^2)}{a\chi}. \quad (2.7)$$

Dans le cas du problème de Cauchy, k parcourt tout $\mathbb{R} \setminus \{0\}$ et la condition devient

$$\rho^* < \frac{b\gamma^2}{a\chi}.$$

On montre ensuite [Ra7] que les solutions stationnaires constantes en dessous du seuil défini ci-dessus à l'équation (2.7) sont stables pour le système non-linéaire complet (2.1) :

Théorème 2.1 *Soit $f, g \in \mathcal{C}^2$, $h \in \mathcal{C}^1$ avec g et h qui vérifient $g(\phi, 0) = 0$ et $h(\phi, 0) > 0$ pour tout ϕ . Soit $(\rho^*, 0, \phi^*)$ une solution stationnaire constante de (2.1) telle que*

$$\chi = \partial_\psi g(\phi^*, 0) > 0, \quad \alpha = h(\phi^*, 0) > 0, \quad \partial_\phi f(\rho^*, \phi^*) = -b < 0 < a = \partial_\rho f(\rho^*, \phi^*). \quad (2.8)$$

On suppose la condition de stabilité suivante :

$$\rho^* < \frac{\lambda^2}{\chi a} \left(b + \frac{D\pi^2}{L^2} \right). \quad (2.9)$$

Soit $w_0 = (\rho_0, v_0, \phi_0) \in H^1$ une perturbation de masse nulle et w la solution correspondante avec les conditions aux bords (2.2). Alors, il existe $\varepsilon_0, C, \theta > 0$ tel que, si $\|w_0\|_{H^1} \leq \varepsilon_0$, alors

$$\|w\|_{H^1}(t) \leq C \|w_0\|_{H^1} e^{-\theta t} \quad \forall t > 0.$$

La preuve du théorème est basée sur une analyse détaillée de la fonction de Green du problème linéarisé calculée à partir des valeurs propres obtenues à la section 2.1.2, qui montre une décroissance exponentielle de la solution du linéarisé. On conclut ensuite à l'aide de la formule de Duhamel pour obtenir l'estimation sur le problème non-linéaire.

Dans le cas où les fonctions f et g vérifient des hypothèses de symétrie supplémentaires, la solution du système reste symétrique au cours du temps. En particulier, si $\frac{\lambda^2}{\chi a} \left(b + \frac{D\pi^2}{L^2} \right) < \int_0^L \rho_0(x) dx < \frac{\lambda^2}{\chi a} \left(b + \frac{4D\pi^2}{L^2} \right)$ et que ρ_0 est symétrique, la solution du système en temps long ne peut pas être la solution stationnaire stable, non constante en espace et non symétrique. Dans ce cas, si la donnée initiale est symétrique, la solution en temps long sera la solution stationnaire constante, même si elle est génériquement instable.

On peut alors affaiblir la condition de stabilité (2.9) du théorème 2.1 et montrer ainsi la stabilité de constantes supérieures au seuil explicité à l'équation (2.9).

Corollaire 2.2 *Soit f, g, h tels que les conditions (2.8) soient vérifiées et on suppose, de plus, que la condition suivante est vérifiée : $g(\phi, -\psi) = -g(\phi, \psi)$, $h(\phi, -\psi) = h(\phi, \psi)$. Soit $(\rho^*, 0, \phi^*)$ une solution stationnaire constante telle que*

$$\rho^* < \frac{\lambda^2}{\chi a} \left(b + \frac{4D\pi^2}{L^2} \right).$$

Alors, la conclusion du théorème 2.1 reste vraie pour $w_0 = (\rho_0, v_0, \phi_0)$ qui vérifient les hypothèses du théorème 2.1 et qui vérifient de plus les hypothèses de symétrie suivantes :

$$\rho_0\left(\frac{L}{2} - x\right) = \rho_0\left(\frac{L}{2} + x\right), v_0\left(\frac{L}{2} - x\right) = -v_0\left(\frac{L}{2} + x\right), \phi_0\left(\frac{L}{2} - x\right) = \phi_0\left(\frac{L}{2} + x\right).$$

2.1.3 Stabilité de la solution stationnaire nulle sur \mathbb{R}

Sur \mathbb{R} , l'étude de la stabilité non-linéaire est plus délicate. On montre alors le résultat suivant [Ra7], à savoir la stabilité de la solution constante nulle sur \mathbb{R} :

Théorème 2.3 *Sous les hypothèses (H_f) , (H_g) , (H_h) , il existe $\varepsilon_0 > 0$ tel que, si*

$$\|\rho_0\|_\infty, \|v_0\|_\infty, \|\rho_0\|_1, \|v_0\|_1, \|\phi_0\|_{1,\infty}, \|\phi_0\|_2 \leq \varepsilon_0,$$

alors il existe une unique solution globale (ρ, v, ϕ) au problème de Cauchy (2.6) telle que

$$\rho, v \in L^\infty(\mathbb{R} \times (0, +\infty)) \cap L^\infty((0, +\infty); L^1(\mathbb{R})), \phi \in W^{1,\infty}(\mathbb{R} \times (0, +\infty)) \cap W^{1,\infty}((0, +\infty); L^2(\mathbb{R})).$$

De plus, soit $(\tilde{\rho}, \tilde{\phi})$ la solution globale du système de Keller-Segel (2.4), alors on a les estimations suivantes, pour tout $t > 0$:

$$\sup_{(0,t)} \{ \max\{1, s^{\frac{1}{2}}\} \|\rho(s) - \tilde{\rho}(s)\|_2 \}, \sup_{(0,t)} \{ \max\{1, s^{\frac{1}{2}}\} \|\phi(s) - \tilde{\phi}(s)\|_2 \} \leq C.$$

Le théorème se prouve à l'aide d'estimations précises sur la décroissance de la fonction de Green pour le linéarisé de la partie hyperbolique du système (2.1), obtenues dans [20], c'est-à-dire pour l'équation des ondes dissipatives. On remarque que la décroissance obtenue ici est polynômiale, alors qu'elle était exponentielle dans le cadre du théorème 2.1. Ces estimations sont combinées à des estimations classiques pour l'équation parabolique du système (2.1), c'est-à-dire l'équation de la chaleur avec terme de réaction linéaire. La comparaison avec les solutions du système parabolique (2.4) se fait de la même manière.

Ce résultat se généralise ainsi en dimension 2 en suivant la même technique [Ra6] :

Théorème 2.4 *Il existe $\varepsilon_0 > 0$ tel que, si*

$$\|\rho_0\|_{H^s}, \|\rho_0\|_{L^1}, \|v_0\|_{H^s}, \|v_0\|_{L^1}, \|\phi_0\|_{H^{s+1}}, \|\phi_0\|_{W^{1,\infty}} \leq \varepsilon_0,$$

alors le problème de Cauchy a une unique solution

$$\rho \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^+; H^s(\mathbb{R}^2)), v \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^+; H^s(\mathbb{R}^2)^2), \phi \in \mathcal{C}(\mathbb{R}^+; H^{s+1}(\mathbb{R}^2)) \quad \text{pour } s \geq 2.$$

De plus, on montre les taux de décroissance suivants pour les fonctions ρ et ϕ :

$$\|\rho(t)\|_{L^\infty} \sim t^{-1}, \quad \|D_x^k \rho(t)\|_{L^2} \sim t^{-\frac{k+1}{2}}, \quad \text{pour } k = 0, 1, 2;$$

$$\|\phi(t)\|_{L^\infty} \sim t^{-\frac{1}{2}}, \quad \|D_x^1 \phi(t)\|_{L^\infty} \sim t^{-1}, \quad \|D_x^k \phi(t)\|_{L^2} \sim t^{-\frac{k+1}{2}} \quad \text{pour } k = 0, 1, 2.$$

Ce résultat a ensuite été généralisé en dimension quelconque par C. Di Russo dans sa thèse [61].

2.2 Un schéma d'ordre élevé asymptotique

Afin d'étudier la stabilité des solutions stationnaires non constantes, difficile à prouver au niveau analytique, nous mettons au point un schéma précis pour les solutions stationnaires, asymptotiquement d'ordre élevé, dont nous étudions les propriétés. Cependant, ce genre de schéma nécessite des conditions aux bords adaptées dans le cas d'un domaine borné $[0, L]$ et nous les calculons de manière à vérifier la propriété (2.3) de conservation de la masse au niveau discret. Nous exposons ici les résultats de l'article [Ra5].

Le système (2.1) peut se diagonaliser comme suit :

$$\begin{cases} \partial_t \rho^- - \lambda \partial_x \rho^- = \frac{1}{2\lambda} (-(\partial_x \phi + \lambda) \rho^- + (\lambda - \partial_x \phi) \rho^+), \\ \partial_t \rho^+ + \lambda \partial_x \rho^+ = \frac{1}{2\lambda} ((\partial_x \phi + \lambda) \rho^- + (\partial_x \phi - \lambda) \rho^+), \\ \partial_t \phi - D \partial_{xx} \phi = a(\rho^- + \rho^+) - b\phi, \end{cases} \quad (2.10)$$

où ρ^+ (resp. ρ^-) est la densité de cellules se déplaçant vers la droite (resp. la gauche). Ces deux variables sont liées aux variables initiales ρ (densité totale de cellules) et v (flux total des cellules) du système (2.1) par les relations suivantes :

$$\rho = \rho^+ + \rho^-, \quad v = \lambda(\rho^+ - \rho^-).$$

Cette diagonalisation permet d'écrire naturellement un schéma upwind pour chacune des deux premières équations du système (2.10) en tenant compte du signe de $\lambda > 0$. L'équation parabolique est discrétisée par un schéma de Crank-Nicolson classique en temps et des différences finies centrées en espace. On a alors construit un schéma consistant avec le système (2.10) et qui conserve les solutions stationnaires constantes, la masse totale et la symétrie des solutions. Cependant, on observe à la figure 2.2 l'état asymptotique obtenu à l'aide de ce schéma pour une donnée initiale au voisinage d'un état stationnaire non constant. On remarque que le flux v ne s'annule pas asymptotiquement, contrairement à ce que prédit l'étude théorique, à cause notamment de la solution stationnaire non constante, très concentrée vers l'origine. Pour remédier à ce problème, on introduit des schémas qui sont d'ordre plus élevé au voisinage des états stationnaires, constants ou non, en ne considérant que la partie hyperbolique du système (2.10).

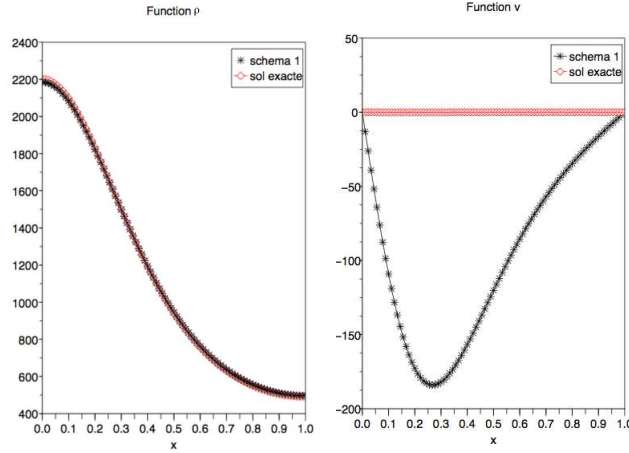


FIGURE 2.2 – Etat asymptotique obtenu par la méthode upwind : pour ρ (à gauche) et pour v (à droite).

2.2.1 Schéma *Asymptotic High Order* pour un système avec source

On introduit alors un schéma de type *Asymptotic High Order* (AHO) [5] dont on détaille le principe ici. On note $\omega = \begin{pmatrix} \rho^- \\ \rho^+ \end{pmatrix}$ et on réécrit la partie hyperbolique du système (2.10) sous la forme :

$$\partial_t \omega + \Lambda \partial_x \omega = B\omega + F,$$

avec $\Lambda = \begin{pmatrix} -\lambda & 0 \\ 0 & \lambda \end{pmatrix}$, $B = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$, $F = \frac{1}{2\lambda} \begin{pmatrix} -f \\ f \end{pmatrix}$.

On note Δx le pas d'espace et Δt le pas de temps, liés par la condition CFL hyperbolique habituelle $\frac{\lambda \Delta t}{\Delta x} \leq 1$. On considère les points de discrétisation $x_j = j \Delta x$, $0 \leq j \leq M+1$, avec $x_0 = 0$ et $x_{M+1} = L$. Les temps de discrétisation sont définis par $t_n = n \Delta t$, $n \in \mathbb{N}$. On note également ω_i^n et F_i^n des approximations de $\omega(x_i, t_n)$ and $F(x_i, t_n)$, et on considère les schémas de la forme générale suivante :

$$\frac{\omega_i^{n+1} - \omega_i^n}{\Delta t} + \frac{\Lambda}{2\Delta x} (\omega_{i+1}^n - \omega_{i-1}^n) - \frac{|\lambda|}{2\Delta x} (\omega_{i+1}^n - 2\omega_i^n + \omega_{i-1}^n) = \sum_{\ell=-1,0,1} (B^\ell \omega_{i+\ell}^n + D^\ell F_{i+\ell}^n), \quad (2.11)$$

où B^ℓ (resp. D^ℓ) sont des matrices 2×2 agissant sur les vecteurs $\omega_{i+\ell}^n$ (resp. $F_{i+\ell}^n$) aux points $x_{i+\ell}$, $\ell = -1, 0, +1$.

Le schéma (2.11) est défini comme suit : à gauche, on retrouve le schéma upwind écrit sous forme visqueuse et à droite, une discrétisation de la source considérée sur un stencil plus grand que le stencil habituel, à savoir le stencil des deux schémas upwind. Le principe de ce schéma est de distribuer l'approximation des termes sources sur tous les points du stencil, afin de prendre en compte l'influence du traitement upwind non seulement sur le flux, mais aussi sur la source.

On définit ensuite les matrices B^ℓ et D^ℓ de façon à ce que les propriétés suivantes soient satisfaites :

- consistance du schéma,
- monotonie du schéma,
- ordre deux (ou plus) pour les solutions stationnaires.

On détaille ici le dernier point. Pour cela, on considère l'équation différentielle vérifiée par une solution stationnaire $\hat{\omega}$, à savoir $\Lambda \partial_x \hat{\omega} = B\hat{\omega} + F$. Cette équation nous suffit dans ce qui suit

et aucune expression plus explicite n'est nécessaire. L'erreur de troncature calculée dans le cas de la solution stationnaire $\hat{\omega}$ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} T\hat{\omega}_i^n &= \frac{\Lambda}{2\Delta x} (\hat{\omega}_{i+1}^n - \hat{\omega}_{i-1}^n) - \frac{|\lambda|}{2\Delta x} (\hat{\omega}_{i+1}^n - 2\hat{\omega}_i^n + \hat{\omega}_{i-1}^n) - \sum_{\ell=-1,0,1} B^\ell \hat{\omega}_{i+\ell}^n - \sum_{\ell=-1,0,1} D^\ell F(x_{i+\ell}, t_n) \\ &= \left((B - (B^{-1} + B^0 + B^1)) \hat{\omega}_i^n + (I_{2,2} - (D^{-1} + D^0 + D^1)) F(x_i, t_n) \right) \\ &\quad - \frac{\Delta x}{2} \left(2(B^1 - B^{-1}) \Lambda^{-1} B \hat{\omega}_i^n + (|\lambda| \Lambda^{-1} B \Lambda^{-1} + 2(B^1 - B^{-1}) \Lambda^{-1}) F(x_i, t_n) \right. \\ &\quad \left. + (|\lambda| \Lambda^{-1} + 2(D^1 - D^{-1})) \partial_x F(x_i, t_n) \right) + O(\Delta x^2). \end{aligned}$$

En cherchant à annuler tous les termes de cette expression, on trouve alors des relations que doivent vérifier les matrices B^ℓ et D^ℓ . Il s'agit d'un certain nombre de relations linéaires, et le système obtenu est donc simple à résoudre.

Remarquons que ce schéma reste en général d'ordre 1, mais est d'ordre supérieur au voisinage des solutions stationnaires. Comme on s'attend à ce que les solutions calculées tendent asymptotiquement vers des solutions stationnaires, l'ordre du schéma s'améliore avec le temps.

Enfin, suite à l'article [Ra5], un schéma de type *well balanced* pour le même système a été proposé [82, 83]. Ce deuxième schéma n'améliore pas la précision des solutions par rapport à la technique AHO, puisque les solutions stationnaires ne peuvent pas être connues explicitement. Le schéma *well balanced* proposé dans [82, 83] est donc limité à l'ordre 2, alors que nous obtenons dans [Ra5] un schéma d'ordre 3.

2.2.2 Calcul des conditions aux bords

Maintenant, nous remarquons que nous devons également adapter les conditions aux bords habituellement utilisées pour le schéma upwind et qu'il nous faut des conditions aux bords supplémentaires à cause du stencil plus large. Deux conditions aux bords évidentes sont données par la version discrète des conditions aux bords (2.2) :

$$v_0^n = v_{M+1}^n = 0. \quad (2.12)$$

On s'intéresse alors à la conservation de la masse (2.3) et on cherche à retrouver au niveau discret cette propriété essentielle ; on remarque, en effet, une forte dépendance par rapport à la masse de la solution stationnaire asymptotique trouvée. Pour cela, on écrit la différence de masse discrète entre deux pas de temps successifs et on annule exactement cette différence. Les termes correspondant aux points intérieurs du domaine se compensent et il reste donc uniquement des termes proches des deux bords, qui nous donnent les deux conditions suivantes :

$$\begin{aligned} \rho_0^{n+1} &= \left(1 - |\lambda| \frac{\Delta t}{\Delta x} - \Delta t \beta_{\rho,\rho}^1 \right) \rho_0^n + \Delta t \left(\frac{|\lambda|}{\Delta x} + \beta_{\rho,\rho}^1 \right) \rho_1^n - \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{\beta_{\rho,v}^1}{\lambda} \right) v_1^n + \frac{\Delta t}{\lambda} \gamma_\rho^1 f_1^n, \\ \rho_{M+1}^{n+1} &= \left(1 - |\lambda| \frac{\Delta t}{\Delta x} - \Delta t \beta_{\rho,\rho}^1 \right) \rho_{M+1}^n + \Delta t \left(\frac{|\lambda|}{\Delta x} + \beta_{\rho,\rho}^1 \right) \rho_M^n + \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{\beta_{\rho,v}^1}{\lambda} \right) v_M^n \\ &\quad - \frac{\Delta t}{\lambda} \gamma_\rho^1 f_M^n, \end{aligned} \quad (2.13)$$

où les $\beta_{\cdot,\cdot}^1$ et les γ^1 sont des coefficients calculés à partir des matrices B^1 et D^1 . On remarque que, à cause de la conservation de la masse de la donnée ρ , les conditions aux bords sont données dans les variables (ρ, v) alors que le schéma est écrit dans les variables (ρ^+, ρ^-) . On vérifie alors que les conditions aux bords discrètes (2.13) sont bien consistantes avec les conditions aux bords (2.2).

2.2.3 Deux exemples de schémas AHO.

Un exemple de schéma d'ordre 2 est le suivant :

$$\begin{cases} \frac{\rho_i^{-,n+1} - \rho_i^{-,n}}{\Delta t} - \lambda \frac{\rho_{i+1}^{-,n} - \rho_i^{-,n}}{\Delta x} = \frac{1}{4}(\rho_i^{+,n} - \rho_i^{-,n}) + \frac{1}{4}(\rho_{i+1}^{+,n} - \rho_{i+1}^{-,n}) - \frac{1}{4\lambda}f_i^n - \frac{1}{4\lambda}f_{i+1}^n, \\ \frac{\rho_i^{+,n+1} - \rho_i^{+,n}}{\Delta t} + \lambda \frac{\rho_i^{+,n} - \rho_{i-1}^{+,n}}{\Delta x} = \frac{1}{4}(\rho_i^{-,n} - \rho_i^{+,n}) + \frac{1}{4}(\rho_{i-1}^{-,n} - \rho_{i-1}^{+,n}) + \frac{1}{4\lambda}f_i^n + \frac{1}{4\lambda}f_{i-1}^n, \end{cases}$$

qui coïncide avec le schéma introduit par Roe [141]. Pour ce schéma, l'originalité de ce travail est de proposer des conditions aux bords, qui s'écrivent :

$$\begin{cases} \rho_0^{n+1} = \left(1 - \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_0^n + \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} \rho_1^n - \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{1}{2\lambda}\right) v_1^n - \frac{\Delta t}{2\lambda} f_1^n, \\ \rho_{M+1}^{n+1} = \left(1 - \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_{M+1}^n + \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} \rho_M^n + \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{1}{2\lambda}\right) v_M^n + \frac{\Delta t}{2\lambda} f_M^n. \end{cases}$$

La condition de monotonie s'exprime ainsi : $\Delta x \leq 4\lambda$ et $\Delta t \leq \frac{4\Delta x}{\Delta x + 4\lambda}$.

Dans le cas de l'ordre 3, on obtient :

$$\begin{cases} \frac{\rho_i^{-,n+1} - \rho_i^{-,n}}{\Delta t} - \lambda \frac{\rho_{i+1}^{-,n} - \rho_i^{-,n}}{\Delta x} = \frac{1}{3}(\rho_i^{+,n} - \rho_i^{-,n}) + \frac{1}{6}(\rho_{i+1}^{+,n} - \rho_{i+1}^{-,n}) \\ \quad + \frac{1}{24\lambda}f_{i-1}^n - \frac{1}{3\lambda}f_i^n - \frac{5}{24\lambda}f_{i+1}^n, \\ \frac{\rho_i^{+,n+1} - \rho_i^{+,n}}{\Delta t} + \lambda \frac{\rho_i^{+,n} - \rho_{i-1}^{+,n}}{\Delta x} = \frac{1}{3}(\rho_i^{-,n} - \rho_i^{+,n}) + \frac{1}{6}(\rho_{i-1}^{-,n} - \rho_{i-1}^{+,n}) \\ \quad + \frac{5}{24\lambda}f_{i-1}^n + \frac{1}{3\lambda}f_i^n - \frac{1}{24\lambda}f_{i+1}^n, \end{cases}$$

avec les conditions aux bords :

$$\begin{cases} \rho_0^{n+1} = \left(1 - \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_0^n + \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} \rho_1^n - \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{5}{6\lambda}\right) v_1^n - \frac{\Delta t}{2\lambda} f_1^n, \\ \rho_{M+1}^{n+1} = \left(1 - \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \rho_{M+1}^n + \lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} \rho_M^n + \Delta t \left(\frac{1}{\Delta x} - \frac{5}{6\lambda}\right) v_M^n + \frac{\Delta t}{2\lambda} f_M^n. \end{cases}$$

La condition de monotonie s'exprime ainsi : $\Delta x \leq 6\lambda$ et $\Delta t \leq \frac{3\Delta x}{\Delta x + 3\lambda}$.

2.2.4 Propriétés du schéma

On montre la convergence du schéma (2.11) [Ra5] :

Théorème 2.5 *Pour toute solution régulière du système (2.1) avec un terme source f régulier, l'approximation donnée par le schéma (2.11), avec les conditions aux bords (2.13), converge et on a l'estimation suivante de l'erreur numérique :*

$$e_n(\Delta x, \Delta t) \leq C e^{t_n \|\mathcal{B}\|^\infty} t_n(\Delta t + \Delta x),$$

où \mathcal{B} (resp. \mathcal{D}) est une matrice formée à partir des éléments des matrices B^ℓ (resp. D^ℓ).

La preuve de ce théorème repose sur le théorème de Lax-Richtmyer pour un schéma linéaire. On peut prouver indépendamment :

- la stabilité L^∞ et L^1 du schéma, donnée par l'inégalité suivante :

$$\|Y^n\|_1 \leq e^{t_n \|\mathcal{B}\|_1} \left(\|Y^0\|_1 + t_n \|\mathcal{D}\|_1 \max_{0 \leq j \leq n-1} \|F^j\|_1 \right),$$

où Y^n est le vecteur composé des valeurs de la solution du schéma (2.11) avec les conditions aux bords (2.13), et qui repose sur une étude des matrices sous-jacentes,

- la consistance du schéma donnée par une estimation de l'erreur de troncature.

A la figure 2.2, on voit que les résultats obtenus avec le schéma AHO (en rouge) sont plus précis que ceux obtenus avec le schéma upwind (en noir). En particulier, le flux v est nul asymptotiquement comme prédit par la théorie. Maintenant que l'on a trouvé un schéma adapté, nous l'utilisons pour trouver des résultats supplémentaires sur le système (2.1).

2.3 Simulations et limites du modèle

Nous présentons ici les résultats numériques de stabilité des solutions stationnaires non constantes, afin de comparer les modèles hyperbolique et parabolique. Ces résultats laissent penser que les solutions stationnaires communes des systèmes (2.1) et (2.4) ont également la même stabilité, cf [Ra5], même si ceci n'a pas été démontré. Cependant, nous avons mis en évidence dans [Ra3] un phénomène qui nous avait échappé au début de l'étude : l'explosion de solutions due à la densité qui devient négative pour des masses assez élevées. Ce phénomène ne possède pas de démonstration théorique pour le moment.

2.3.1 Résultats numériques

On peut étudier numériquement la stabilité des solutions stationnaires présentées précédemment grâce au schéma AHO détaillé à la section 2.2. Le temps final dépend des simulations et est calculé grâce à un test d'arrêt.

A la figure 2.3, les données initiales¹ sont des perturbations de la constante 1135, à savoir une solution stationnaire constante entre les deux premiers points de bifurcation. Comme attendu par l'étude du linéarisé du système (2.1), la constante est instable pour une perturbation quelconque et la solution de la première branche \mathcal{B}_1 est stable. Pour une perturbation symétrique, comme vu au corollaire 2.2, la solution constante est bien stable.

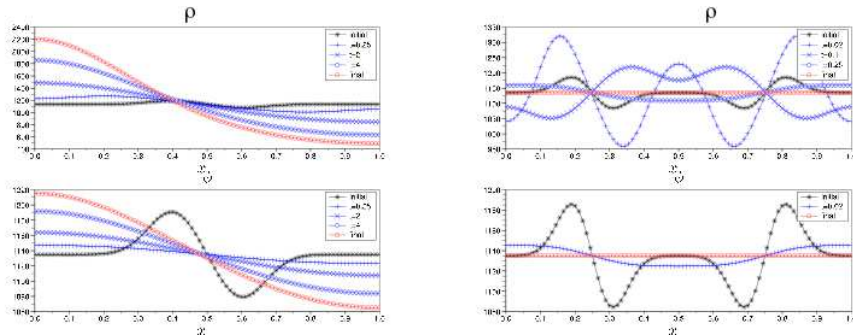


FIGURE 2.3 – Evolution des solutions ρ (en haut) et ϕ (en bas) sur l'intervalle $[0, 1]$. Les données initiales (en noir) sont des perturbations de la constante 1135. A gauche, il s'agit d'une perturbation quelconque et à droite, d'une perturbation symétrique.

1. avec les paramètres $a = b = D = 1$ et $\lambda = 10$ sur l'intervalle $[0, 1]$.

Ensuite, à la figure 2.4, nous refaisons les mêmes simulations en partant de perturbations de la constante 4100, située après le deuxième point de bifurcation. On voit que pour une perturbation quelconque, on converge asymptotiquement vers la solution stationnaire de la première branche \mathcal{B}_1 , alors que pour une perturbation symétrique, on converge vers une solution stationnaire symétrique. Cette fois-ci, contrairement au test précédent, ce n'est plus la constante mais une solution stationnaire de la deuxième branche \mathcal{B}_2 .

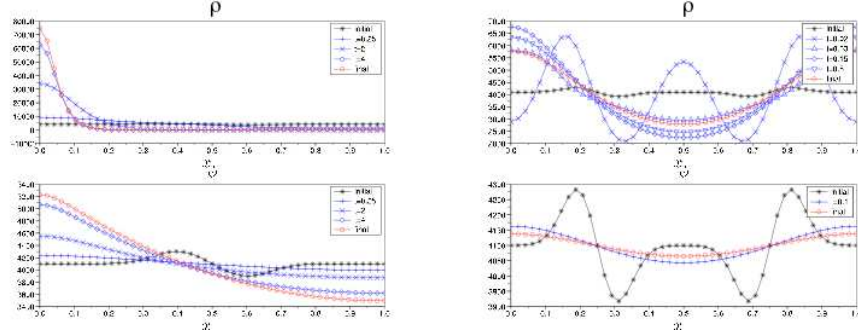


FIGURE 2.4 – Evolution des solutions ρ (en haut) et ϕ (en bas) sur l'intervalle $[0, 1]$. Les données initiales (en noir) sont des perturbations de la constante 4100. A gauche, il s'agit d'une perturbation quelconque et à droite, d'une perturbation symétrique.

Enfin, nous effectuons une comparaison numérique des solutions des deux systèmes parabolique (2.4) et hyperbolique (2.1), toujours pour les mêmes paramètres, en partant d'une perturbation de la même constante 1135. On remarque à la figure 2.5 que le comportement asymptotique est identique. En revanche, le comportement transitoire est différent : la solution ρ oscille beaucoup moins et converge plus vite pour le système parabolique. La fonction ϕ , quant à elle, a à peu près la même allure dans les deux cas.

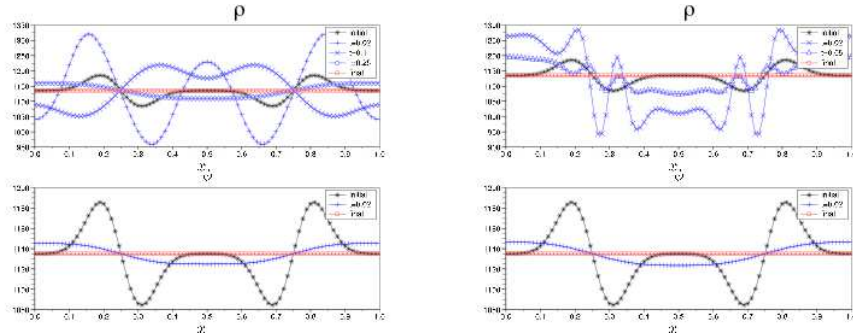


FIGURE 2.5 – Comparaison des systèmes hyperbolique et parabolique. Evolution des solutions ρ (en haut) et ϕ (en bas) sur l'intervalle $[0, 1]$, à gauche, pour le système hyperbolique et à droite, pour le système parabolique. La donnée initiale (en noir) est une perturbation de la constante 1135.

En dimension 2, les simulations numériques laissent présager un comportement similaire à celui du système de Keller-Segel (2.4), à savoir l'existence globale de la solution si la masse est petite et l'explosion de la solution si la masse est grande, cf figure 2.6. Le schéma utilisé ici est un schéma de type relaxation avec des limiteurs de flux [6], car on ne sait pas, pour l'instant, généraliser les schémas AHO en dimension supérieure; en effet, les premiers calculs dans ce sens montrent que le nombre de degrés de liberté introduits n'est pas suffisant pour permettre de calculer un schéma satisfaisant aux critères demandés.

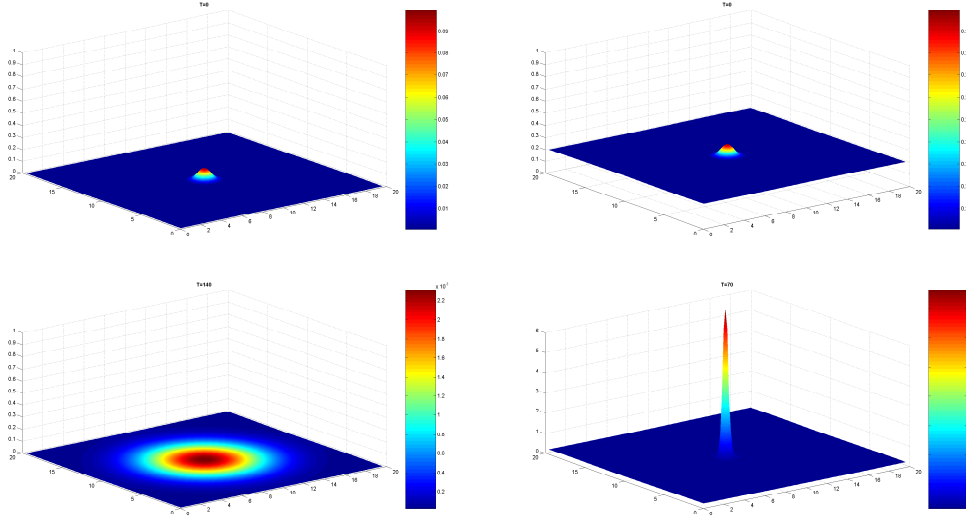


FIGURE 2.6 – Simulations numériques en 2D sur un domaine $[0, 20] \times [0, 20]$, fonction ρ . En haut, les deux conditions initiales : une perturbation de 0 à gauche, une perturbation de 0.2 à droite. En bas, les solutions à des temps avancés ($T = 140$ à gauche, $T = 70$ à droite).

2.3.2 Limites du modèle

Nous considérons ici le cas $L = 1$ et $\lambda = 10$ et nous prenons comme condition initiale pour ρ et ϕ une perturbation de la solution constante égale à 9000. La figure 2.7 montre que la solution explose au temps $T = 0.1$. Cette explosion semble être associée à des valeurs négatives de la densité ρ , valeurs non physiques. En raffinant le maillage, cette explosion reste présente au même endroit et au même temps, ce qui exclut une instabilité numérique. Ceci semble être lié à la violation de la condition sous-caractéristique [125], lorsque le gradient $\partial_x \phi$ devient plus grand que λ , condition suffisante qui assure que la solution reste positive. Cependant, cette condition n'étant pas nécessaire, nous avons pu mener des simulations numériques alors que la condition sous-caractéristique était violée. On remarque également que cette explosion n'intervient que pour des masses assez élevées, mais cette propriété n'a pas pu être prouvée, ni quantifiée au niveau théorique.

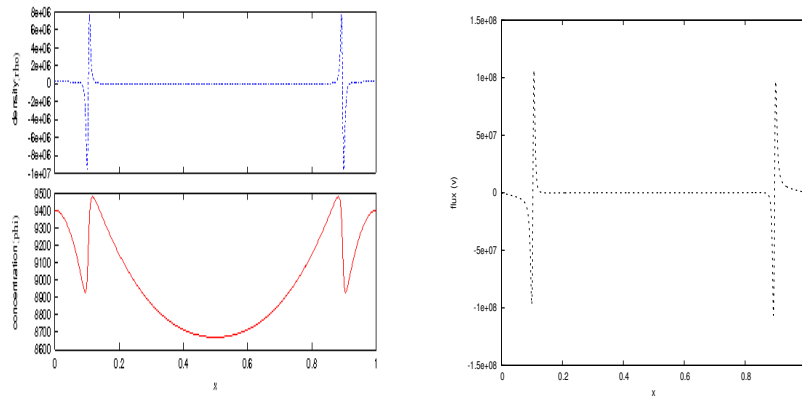


FIGURE 2.7 – Explosion de la solution au temps $T = 0.1$: sur la gauche, explosion des fonctions ρ et ϕ et sur la droite du flux v .

Conclusion

En conclusion, nous avons étudié dans ce chapitre un premier modèle hyperbolique semi-linéaire (2.1) que nous avons cherché à comparer avec le modèle de Keller-Segel bien connu (2.4). Pour cela, nous nous sommes servis aussi bien d'outils analytiques que numériques, en développant un schéma adapté. L'analyse de stabilité nous a permis de prouver que la stabilité des états stationnaires constants est la même pour les deux modèles, alors que des simulations numériques nous montrent que ce résultat se généralise aux états stationnaires non constants. Les simulations numériques montrent, en revanche, des différences dans les comportements transitoires de ces deux modèles.

Nous avons aussi mis en évidence numériquement les limites de ce modèle qui ne préserve pas la positivité des densités pour des masses assez grandes. Comme ce modèle se comporte, par ailleurs, de façon attendue pour des masses petites et qu'il reste un modèle hyperbolique assez simple, il serait intéressant de quantifier l'ensemble des paramètres pour lesquels le modèle préserve la positivité, c'est-à-dire pour lesquels le modèle est fiable.

Chapitre 3

Un modèle quasi-linéaire hyperbolique de chimiotactisme

Sommaire

Contexte biologique	38
3.1 Etude des solutions stationnaires avec vide	40
3.1.1 Classification des solutions stationnaires	41
3.1.2 Comparaison des énergies de ces solutions stationnaires	43
3.1.3 Simulations numériques de la stabilité des solutions stationnaires . . .	43
3.2 Un schéma <i>well balanced</i> de reconstruction aux interfaces	44
3.2.1 Schéma de reconstruction aux interfaces	47
3.2.2 Différentes reconstructions possibles	48
3.2.3 Propriétés des schémas semi-discrets et discrets	50
3.3 Simulations numériques	51
3.4 Comparaison avec un système parabolique limite	52
3.4.1 Limite temps long-forte friction du système hyperbolique	53
3.4.2 Propriété <i>asymptotic preserving</i> du schéma	53
3.4.3 Simulations numériques	54
Conclusion	55

Dans ce chapitre, nous nous concentrons sur le modèle (1.5) proposé dans [147] pour décrire la vasculogénèse et rappelé ici en 1D :

$$\begin{cases} \partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0, \\ \partial_t(\rho u) + \partial_x(\rho u^2 + p(\rho)) = -\alpha \rho u + \chi \rho \partial_x \phi, \\ \partial_t \phi = D \partial_{xx} \phi + a \rho - b \phi. \end{cases} \quad (3.1)$$

avec

$$p(\rho) = \kappa \rho^\gamma. \quad (3.2)$$

Les inconnues sont la densité $\rho(x, t)$, la vitesse $u(x, t)$ et la concentration $\phi(x, t)$ avec $x \in \Omega (= \mathbb{R} \text{ ou } [0, L])$ et $t > 0$.

Par rapport au chapitre précédent, le modèle comporte deux différences : la présence du terme inertiel non linéaire et la présence de la pression non linéaire. La principale difficulté pour l'étude de ce modèle, aussi bien au niveau analytique que numérique, est l'apparition de zones de vide dans les solutions au cours du temps. Après un rappel du contexte biologique, nous allons commencer par décrire toutes les solutions stationnaires du système (3.1) avec une ou plusieurs zones de vide et par calculer leurs énergies afin de les comparer. Nous proposerons ensuite un schéma numérique adapté, précis au voisinage des solutions stationnaires et qui traite bien le vide. Enfin, nous étudierons si le schéma proposé est cohérent avec la limite temps long-forte friction du système, à savoir le système parabolique correspondant.

Ce chapitre correspond aux articles [Rs1], [Ra1] et [Ra2].

Contexte biologique

L'étude de la formation de vaisseaux sanguins [145] a connu un intérêt accru ces dernières années et est utile, entre autres, pour les thérapies anti-cancéreuses pour deux raisons : on peut espérer contrôler la vascularisation des tumeurs via des thérapies anti-angiogéniques, mais on peut espérer aussi qu'une normalisation du réseau sanguin permette une meilleure diffusion des médicaments autour de la tumeur.

La formation de réseaux sanguins vascularisés est le fruit de deux mécanismes différents : la vasculogénèse et l'angiogénèse. Nous considérons ici le phénomène de vasculogénèse, c'est-à-dire le processus de formation *de novo* de vaisseaux sanguins pendant les premiers stades de développement d'un organisme à partir de progéniteurs endothéliaux. L'angiogénèse, quant à elle, est un autre type de processus de croissance de vaisseaux sanguins, associé à la réparation et au remodelage de vaisseaux existants.

Tout d'abord, les cellules endothéliales progénitrices endothéliales migrent et se différencient en des cellules endothéliales en réponse à des signaux locaux, comme des facteurs de croissance. Ensuite, ces cellules diffusent et produisent des facteurs chimiques, comme le VEGF (Vascular Endothelial Growth Factor) pour interagir les unes avec les autres via du chimiotactisme. Elles forment alors un réseau de vaisseaux sanguins. Contrairement à l'angiogénèse, la vasculogénèse peut être reproduite par des expériences *in vitro* : les cellules endothéliales, maintenues dans une solution physiologique, sont déposées sur un substrat spécifique qui favorise la mobilité des cellules et a des caractéristiques biochimiques similaires aux tissus vivants. Les cellules choisissent alors une direction corrélée aux zones de fortes densités et migrent jusqu'à entrer en collision avec les voisins les plus proches. Après la collision, les cellules s'attachent avec leurs voisins et forment un réseau multi-cellulaire, qui va devenir plus fin ensuite. Ce processus est régulé par trois facteurs : la présence de facteurs de croissance, tels le VEGF, la densité de cellules et l'interaction avec la matrice extra-cellulaire.

Les expériences *in vitro* de vasculogénèse effectuées par l'équipe de Serini [147] en utilisant des cellules endothéliales humaines sur Matrigel, reproduisent la première phase de migration

et étudient la dépendance en la densité, déjà observée *in vivo*. Ainsi, au-dessus d'un seuil de densité de cellules, vers 100 cellules/mm², le réseau se forme (cf figure 3.1) et est caractérisé par des distances inter-capillaires typiques, idéales pour un échange métabolique optimal. En dessous de seuil, le réseau ne se développe pas et au-dessus d'un second seuil, le réseau est inutilement trop fin. On observe également pour des densités très élevées la formation d'une structure "gruyère", à savoir un tapis continu de cellules avec des trous.

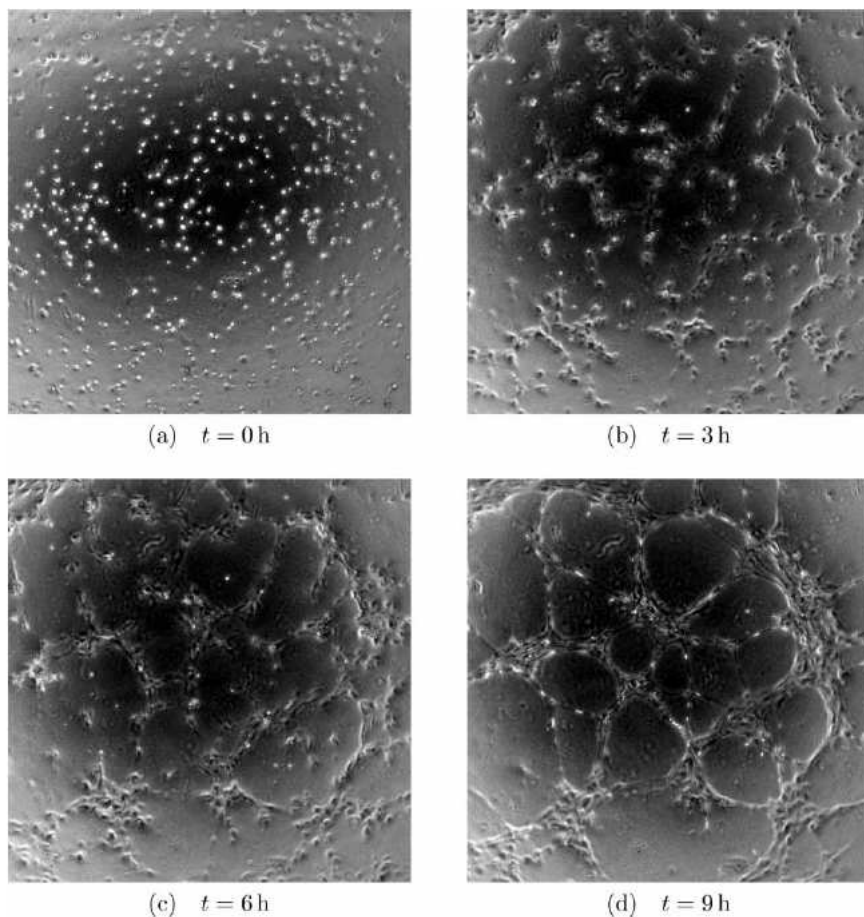


FIGURE 3.1 – Expériences de formation de vaisseaux sanguins par vasculogénèse [147]

Dans [147], le modèle (3.1) est alors proposé pour décrire ces expériences et il est basé sur les hypothèses suivantes : les cellules endothéliales sont persistantes dans leur mouvement, elles communiquent via la production et l'absorption d'un facteur de croissance (VEGF-A), elles ne se reproduisent pas et ne meurent pas durant le processus, elles sont ralenties par la friction due à l'interaction avec le substrat ; enfin, les cellules trop proches répondent mécaniquement pour éviter de trop fortes concentrations. Des simulations numériques de ce modèle ont alors été effectuées. Nous essayons de contribuer à l'étude de ce modèle dans ce chapitre en étudiant les solutions stationnaires dans le cas mono-dimensionnel et en développant un schéma numérique adapté. D'un point de vue mathématique, on considère que l'émergence de structures, comme des réseaux de capillaires, peut être vue comme l'apparition de solutions non constantes avec des zones de vide.

3.1 Etude des solutions stationnaires avec vide

Dans cette section, nous commençons par présenter toutes les solutions stationnaires avec vide du système (3.1) sur $[0, L]$ ou sur \mathbb{R} et à comparer leurs énergies respectives. On appellera par la suite " bump " une région de densité strictement positive, entourée de deux régions de vide et " demi-bump " un bump coupé en son milieu et collé à une extrémité de l'intervalle. Sur $[0, L]$, si L est assez grand, on peut construire des solutions avec autant de bumps que voulu ; en revanche, sur \mathbb{R} , il n'existe qu'une seule solution bump. L'autre résultat étonnant est qu'il existe une infinité de solutions de type 2 bumps, définies par un paramètre. En comparant les énergies de ces solutions sur $[0, L]$, on se rend compte que celle composée d'1 demi-bump à une extrémité est celle d'énergie minimale. Les résultats présentés dans cette section ont été ébauchés dans [Ra1] et approfondis dans [Rs1]. Notons que ce type de solutions avec zones de vide se retrouve dans d'autres contextes d'agrégation [75, 74], ou de mouvement collectif de particules ou d'individus [44, 156, 117], où des solutions de type "anneau" peuvent se développer.

Nous cherchons les solutions stationnaires du système (3.1), soit sur \mathbb{R} tout entier, soit sur un intervalle borné $[0, L]$ avec des conditions de type " no-flux " aux bords :

$$\partial_x \rho(0, \cdot) = \partial_x \rho(L, \cdot) = 0, \quad \partial_x \phi(0, \cdot) = \partial_x \phi(L, \cdot) = 0, \quad \rho u(0, \cdot) = \rho u(L, \cdot) = 0 \quad \text{sur} \quad \partial\Omega. \quad (3.3)$$

Dans ces deux cas, en régime stationnaire, le moment ρu est nul et les deux densités ρ et ϕ vérifient les équations suivantes :

$$\begin{cases} \partial_x p(\rho) = \chi \rho \partial_x \phi, \\ D \partial_{xx}^2 \phi + a \rho - D \beta^2 \phi = 0, \end{cases} \quad (3.4)$$

où β est défini par $b = D \beta^2$ avec $\beta \geq 0$. Nous imposons que les densités soient positives, c'est-à-dire

$$\rho, \phi \geq 0 \quad (3.5)$$

et qu'elles aient les régularités suivantes :

$$\rho \in \mathcal{C}^0(\Omega), \quad \phi \in \mathcal{C}^2(\Omega). \quad (3.6)$$

A part pour le cas dégénéré $\gamma = 1$ traité numériquement dans [78], où les solutions restent toujours strictement positives, la valeur du paramètre γ n'est pas claire dans un contexte biologique et on considère toutes les valeurs de $\gamma > 1$, valeurs pour lesquelles des zones de vide peuvent apparaître dans la solution. Le cas $\gamma = 3$ a été étudié dans [156], mais pour des potentiels différents de celui considéré ici. Ici, nous nous concentrons sur le cas $\gamma = 2$, qui est le seul cas pour lequel on peut trouver des expressions analytiques exactes pour les solutions du système (3.4). En particulier, la première équation de (3.4) se simplifie en $2\kappa\rho\partial_x\rho = \chi\rho\partial_x\phi$, ce qui donne $\rho = 0$ ou $2\kappa\rho = \chi\phi - K$ avec K constante. Ces deux relations définissent deux types d'intervalles : ceux où ρ est nul (les zones de vide) et ceux où ρ est strictement positif. Il nous faut ensuite trouver des conditions pour définir une solution avec une transition entre ces deux types d'intervalle, tout en vérifiant les conditions (3.5) et (3.6) et les conditions aux bords éventuelles (3.3).

On peut montrer facilement que la relation suivante sur les paramètres $a\chi - 2b\kappa > 0$ est nécessaire pour construire de telles solutions, et que dans le cas contraire où $a\chi - 2b\kappa \leq 0$, seules les solutions stationnaires constantes sur un intervalle borné existent.

3.1.1 Classification des solutions stationnaires

Nous décrivons maintenant toutes les solutions stationnaires de $[0, L]$ vérifiant les propriétés précédentes. En extrapolant les résultats qui suivent, on ne peut construire une solution (pas forcément unique) composée de k demi bumps que si la condition suivante qui relie la longueur du domaine aux paramètres du système est vérifiée :

$$L \geq \frac{k\pi}{\omega}, \text{ où } \omega^2 = \frac{a\chi}{2D\kappa} - \beta^2. \quad (3.7)$$

Dans cette formule, un bump est représenté par deux demi-bumps. En d'autres termes, une fois la longueur L fixée, seul un nombre fini de configurations est possible.

Les résultats qui suivent ont été obtenus en calculant exactement les fonctions ρ et ϕ : dans les zones de vide, correspondant à $\rho = 0$, ϕ est une combinaison d'exponentielles ; dans les zones où ρ est strictement positif, ρ et ϕ sont des combinaisons de sinus et cosinus. Il reste ensuite à ajuster les constantes pour que les solutions cherchées aient la régularité voulue.

On se fixe donc une longueur d'intervalle L et on cherche les solutions stationnaires de masse $M = \int_0^L \rho(x) dx$ donnée, où $M > 0$.

Constantes. La seule solution constante en espace de masse M est donnée par :

$$(\rho, \phi) = \left(\frac{M}{L}, \frac{aM}{LD\beta^2} \right),$$

quel que soit le signe de $\frac{a\chi}{2D\kappa} - \beta^2$. A partir de maintenant, on suppose que $\frac{a\chi}{2D\kappa} - \beta^2 > 0$.

Un bump. Il existe une unique solution formée d'1 bump de masse M , à condition que $L \geq \frac{2\pi}{\omega}$. Cette solution est symétrique par rapport à $L/2$. En utilisant les notations de la figure 3.2, on peut définir les longueurs des zones de vide par la formule suivante :

$$H(d_0) = L \text{ avec } H(d) = 2d + \frac{2}{\omega} \left[\pi - \arctan \left(\frac{\omega}{\beta} \tanh(\beta d) \right) \right], \quad d_1 = d_0.$$

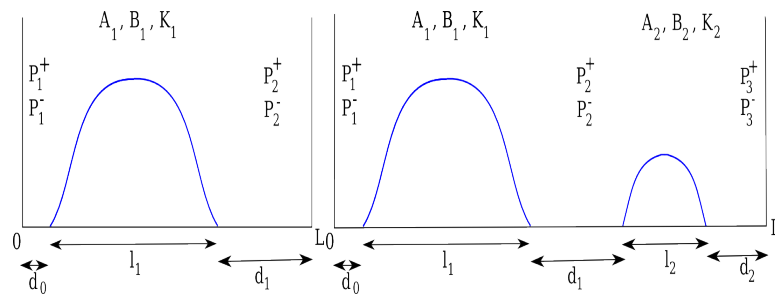


FIGURE 3.2 – Notations utilisées pour le cas d'1 bump (à gauche) et de 2 bumps (à droite) dans l'intervalle $[0, L]$.

Un demi-bump. Grâce à la symétrie du bump calculé au paragraphe précédent, on peut construire une solution composée d'1 demi-bump collé à une extrémité de l'intervalle dès que $L \geq \frac{\pi}{\omega}$. Cette solution est unique à une symétrie près, c'est-à-dire que le demi-bump peut se situer à gauche ou à droite de l'intervalle.

Deux bumps. On essaie maintenant de construire une solution formée de 2 bumps dans l'intervalle. On montre qu'une telle solution est nécessairement la concaténation de 2 bumps

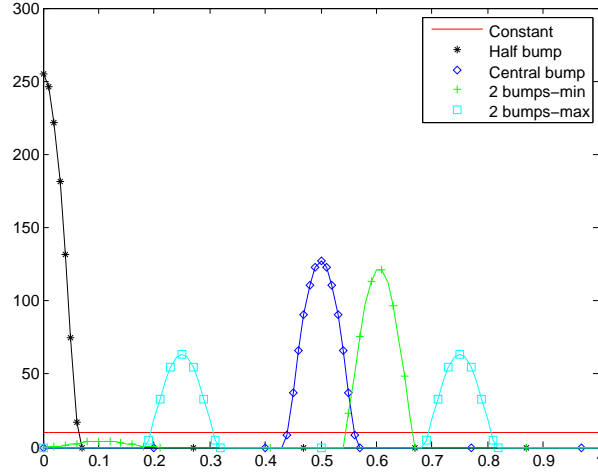


FIGURE 3.3 – Densité ρ pour différents types de solutions stationnaires : constante (en rouge), 1 demi-bump (en noir), 1 bump (en bleu), 2 bumps d'énergie minimale (en vert), 2 bumps symétriques d'énergie maximale (en bleu cyan).

décrits au paragraphe " Un bump ", définis sur des intervalles plus petits L_1 et L_2 tels que $L_1 + L_2 = L$, dès que $L \geq \frac{4\pi}{\omega}$. Il existe alors une infinité de telles solutions, définies par le paramètre d_0 du premier bump (cf figure 3.2). Le paramètre correspondant pour le second bump est alors d_2 tel que $H(d_2) = L - H(d_0)$ et $d_1 = d_0 + d_2$. Les masses des 2 bumps sont données par la formule suivante :

$$(M_1, M_2) = M \left(\frac{G(d_0)}{G(d_0) + G(d_2)}, \frac{G(d_2)}{G(d_0) + G(d_2)} \right),$$

avec

$$G(d) = \cosh(\beta d) \left(\pi - \arctan\left(\frac{\omega}{\beta} \tanh(\beta d)\right) + \frac{\omega}{\beta} \tanh(\beta d) \right).$$

On remarque qu'il y a deux configurations extrêmes, en tenant compte de la symétrie de la configuration entre les 2 bumps : le cas où $d_0 = 0$ et le cas de 2 bumps symétriques tels que $d_0 = d_2 = H^{-1}(L/2)$.

Deux demi-bumps aux extrémités et un bump et demi. On construit une solution formée de 2 bumps sur un intervalle de longueur $2L$ et pour une masse $2M$, puis on garde seulement la moitié du domaine et de la solution pour obtenir une solution composée de 2 demi-bumps aux deux extrémités de l'intervalle $[0, L]$. De même, on utilise une réflexion à une extrémité de l'intervalle afin de construire une solution de type 1 bump et 1 demi bump à une extrémité.

On peut voir à la figure 3.3 la représentation de la densité ρ d'une partie de ces états stationnaires¹ et à la figure 3.4, les fonctions ϕ correspondant à des solutions 1 demi-bump et 1 bump pour ρ .

Remarque 3.1 *On peut aussi chercher les solutions stationnaires non constantes en espace et sans zone de vide. Ces solutions n'existent que dans le cas particulier où $\omega L \in \pi\mathbb{N}$ et la densité ρ est alors composée d'arcs de sinusoides.*

Remarque 3.2 *En suivant des calculs similaires, on peut montrer que dans le cas de \mathbb{R} tout entier, la seule solution stationnaire à masse fixée, à une translation près, est 1 bump unique.*

1. Les paramètres sont les suivants : $\kappa = 1$, $\chi = 10$, $D = 0.1$, $a = 20$, $b = 10$, $L = 1$ et $M = 10$.

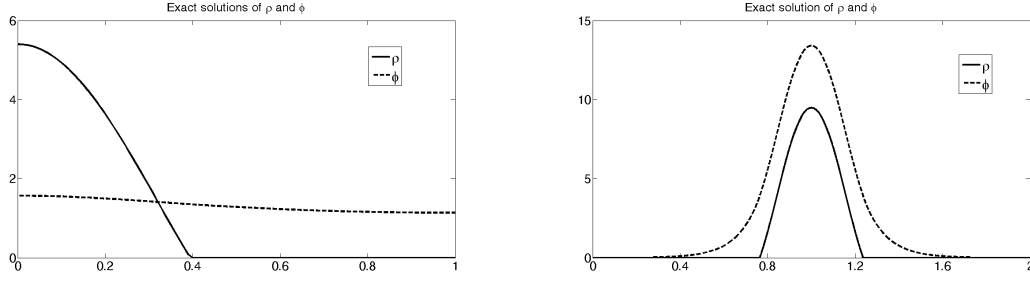


FIGURE 3.4 – À gauche, solution 1 demi-bump pour ρ et fonction ϕ correspondante ; à droite, solution 1 bump pour ρ et fonction ϕ correspondante.

3.1.2 Comparaison des énergies de ces solutions stationnaires

On définit l'énergie suivante pour une solution quelconque du système (3.1) :

$$J(\rho, u, \phi)(t) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} \rho u^2 + \Gamma(\rho) - \chi \rho \phi + \frac{\chi D \beta^2}{2a} \phi^2 + \frac{\chi D}{2a} (\partial_x \phi)^2 \right) dx,$$

où Γ est définie par $\rho \Gamma''(\rho) = p'(\rho)$. En particulier pour $\gamma = 2$, on a $\Gamma(\rho) = \kappa \rho^2 = p(\rho)$. Cette énergie décroît avec le temps. Dans le cas d'une solution stationnaire, le moment s'annule et l'expression peut être simplifiée ainsi :

$$J(\rho, \phi) = \int_{\Omega} \left(\Gamma(\rho) - \frac{\chi}{2} \phi \rho \right) dx.$$

À partir de cette expression simple, on peut calculer une énergie associée à chacune des solutions explicitées précédemment, à la section 3.1.1, et on peut montrer les comparaisons suivantes :

- Pour tout $L > \frac{\pi}{\omega}$, l'énergie d'une solution demi-bump est plus petite que celle de la solution constante de même masse.
- Pour tout $L > \frac{2\pi}{\omega}$, l'énergie d'une solution demi-bump est plus petite que celle de la solution bump, qui est plus petite que celle de la solution constante.
- Pour tout $L > \frac{4\pi}{\omega}$, l'énergie d'une solution 2 bumps est plus petite que celle de la solution constante. L'énergie de 2 bumps est croissante avec d_0 et l'énergie de la solution symétrique, correspondant au d_0 maximal, est plus grande que l'énergie d'1 bump.

Ces inégalités sont résumées à la figure 3.5, où sont représentées les énergies des solutions stationnaires en fonction de la longueur du domaine. On en conclut que la solution constante est celle avec l'énergie la plus grande, alors que le demi-bump, lorsqu'il existe, a la plus petite énergie ; on s'attend donc à ce que ce soit une solution stationnaire stable.

3.1.3 Simulations numériques de la stabilité des solutions stationnaires

Pour étudier la stabilité des solutions stationnaires, nous avons dû concevoir des schémas spécifiques, qui seront décrits plus loin. Les simulations mettent en évidence deux situations très différentes :

Cas 1. Nous considérons les paramètres $\kappa = 2$, $\gamma = 2$, $\chi = 10$, $D = 0.1$, $a = 20$, $b = 10$, $\alpha = 1$ sur un domaine de longueur $L = 3$. En utilisant la formule (3.7), on trouve $1 \leq k \leq 28$, c'est-à-dire que l'on peut construire des solutions stationnaires composées d'au plus 14 bumps (ou 13

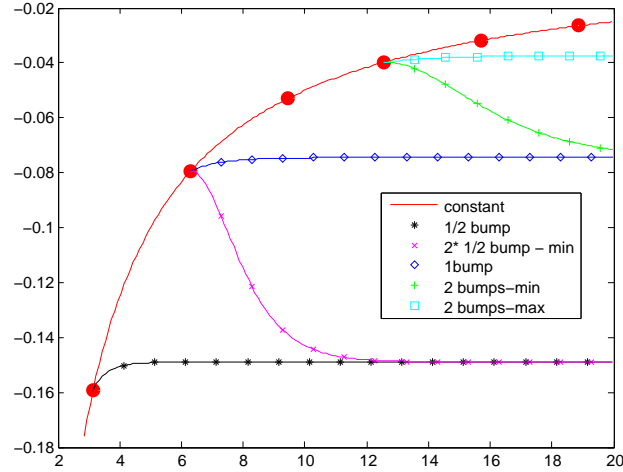


FIGURE 3.5 – Graphe des énergies des différents types de solutions stationnaires (constante, demi-bump, 2 demi-bumps, 1 bump, 2 bumps,...) en fonction de la longueur L du domaine.

bumps à l'intérieur de l'intervalle et 2 demi bumps aux extrémités). Nous étudions la stabilité de différentes configurations : 1 demi-bump, 2 demi-bumps, 1 bump, 2 bumps. Quand il s'agit de 2 demi-bumps ou de 2 bumps, nous avons testé la stabilité de différentes solutions possibles (les deux extrêmes et une intermédiaire) et il s'avère que toutes ces configurations sont stables numériquement, cf figure 3.6. On choisit la perturbation initiale de telle sorte que la densité reste positive et que la masse reste identique.

Cas 2. Nous considérons les paramètres $\kappa = 2$, $\gamma = 2$, $\chi = 50$, $D = 1$, $a = 4$, $b = 1$, $\alpha = 1$ sur un domaine de longueur $L = 2$. En utilisant la formule (3.7), on trouve $1 \leq k \leq 6$, c'est-à-dire que l'on peut construire des solutions stationnaires composées d'au plus 3 bumps (ou 2 bumps à l'intérieur de l'intervalle et 2 demi bumps aux extrémités). Cette fois-ci, nous testons la stabilité des solutions 1 bump et 2 bumps et nous présentons les résultats à la figure 3.7. Nous voyons que ces deux configurations sont instables et que les solutions asymptotiques obtenues sont respectivement 1 demi-bump et 2 demi-bumps. Les résultats pour les autres solutions de type 2 bumps sont identiques.

Ces deux cas nous montrent qu'il est difficile d'avoir une réponse claire et générale à la question de la stabilité des solutions stationnaires. Celle-ci semble dépendre fortement des paramètres du système.

A la section suivante, nous proposons un schéma numérique adapté à l'étude de ce système. Les solutions stationnaires que nous venons de calculer permettront de contrôler les résultats numériques obtenus dans certains cas et dans d'autres cas, le schéma décrit permettra d'étudier des propriétés des états stationnaires, impossibles à prouver mathématiquement, comme leur stabilité. Dans la suite de ce chapitre, nous ne nous restreignons plus au cas $\gamma = 2$.

3.2 Un schéma *well balanced* de reconstruction aux interfaces

Nous allons maintenant construire un schéma fiable afin d'effectuer des simulations numériques du système (3.1) pour γ quelconque. Le système (3.1) couple des équations de différentes natures, c'est-à-dire un système quasi-linéaire de lois de conservation avec sources couplé avec une équation parabolique pour l'évolution du chimioattractant. La discrétisation en temps de

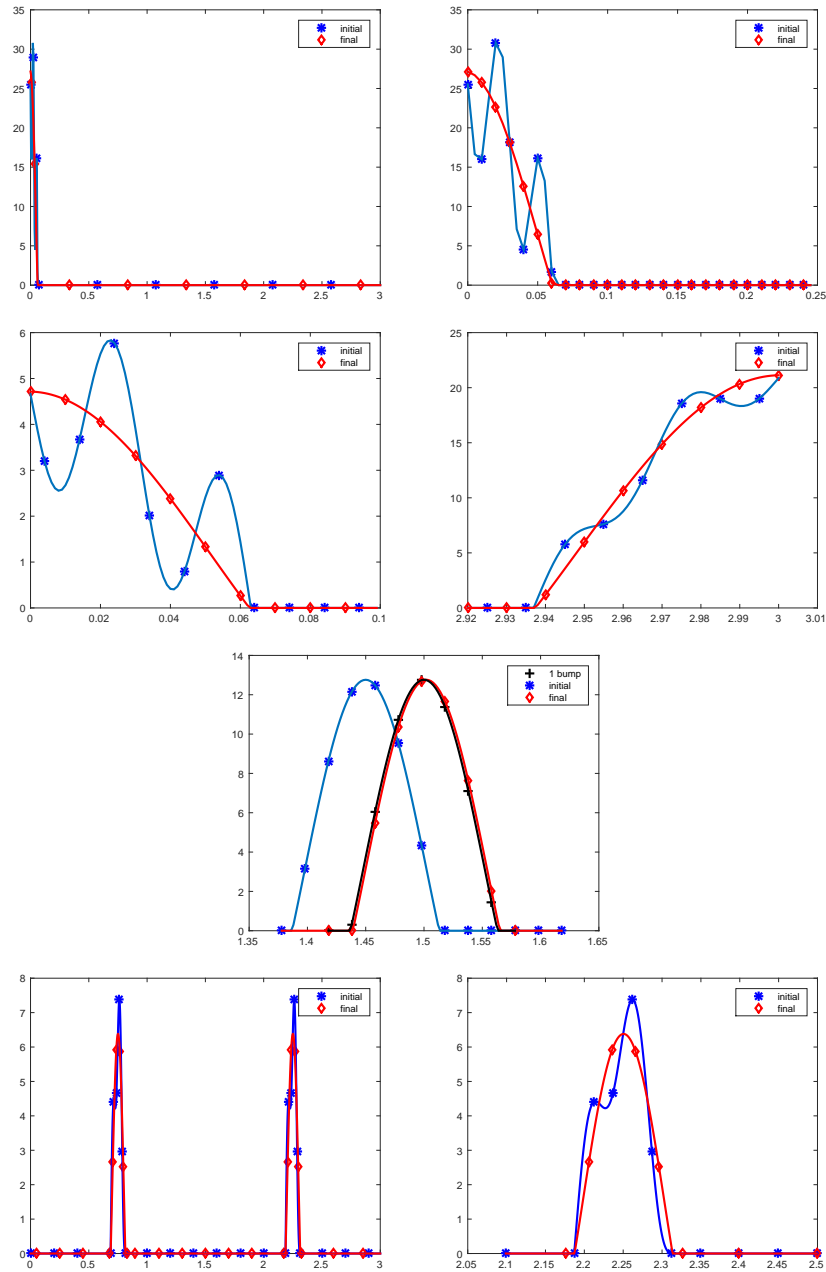


FIGURE 3.6 – Cas 1 - Stabilité des solutions stationnaires suivantes : 1 demi-bump (1^{re} ligne), 2 demi-bumps (2^e ligne), 1 bump (3^e ligne), 2 bumps (4^e ligne) avec des zooms.

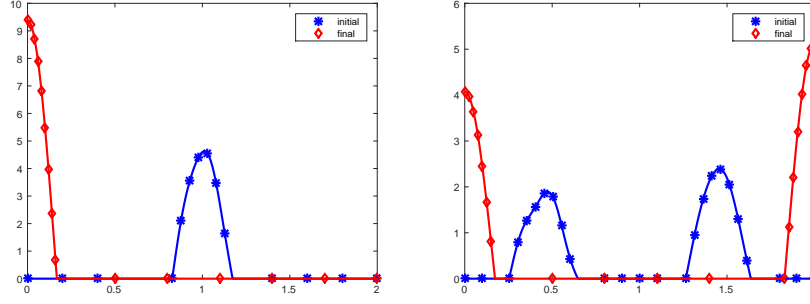


FIGURE 3.7 – Cas 2 - A gauche, la solution 1 bump est instable (et le demi-bump est stable). A droite, la solution 2 bumps est instable (et la solution 2 demi-bumps est stable).

la partie parabolique peut être effectuée en utilisant le schéma classique explicite-implicite de Crank-Nicolson. En revanche, pour la partie hyperbolique, les méthodes aux différences finies classiques testées, de type relaxation pour la partie homogène avec source traitée avec une discrétisation centrée, présentent plusieurs inconvénients : diffusion trop forte, non conservation de la masse et mauvaise approximation des solutions stationnaires. Deux problèmes majeurs se dégagent : traiter le vide correctement et approcher précisément les solutions stationnaires. Nous utilisons alors des schémas aux volumes finis avec une reconstruction aux interfaces, qui conservent les solutions stationnaires et la positivité des solutions et qui traitent correctement les zones de vide. Plusieurs reconstructions sont proposées et comparées. Cette section correspond principalement à l'article [Ra1] et à une partie de [Ra2].

Nous représentons à la figure 3.8 les solutions asymptotiques obtenues au temps $T = 100$ pour différents schémas : différences finies classiques sans technique *well balanced* (DC - en bleu), volumes finis classiques sans *well balanced* (VC - en rose) et volumes finis avec technique *well balanced* (VW - en vert). Nous partons d'une perturbation d'1 demi-bump² et la solution exacte, donnée par le calcul de la solution stationnaire, est représentée en rouge. Nous remarquons que les volumes finis avec *well balanced* donnent clairement la meilleure précision.

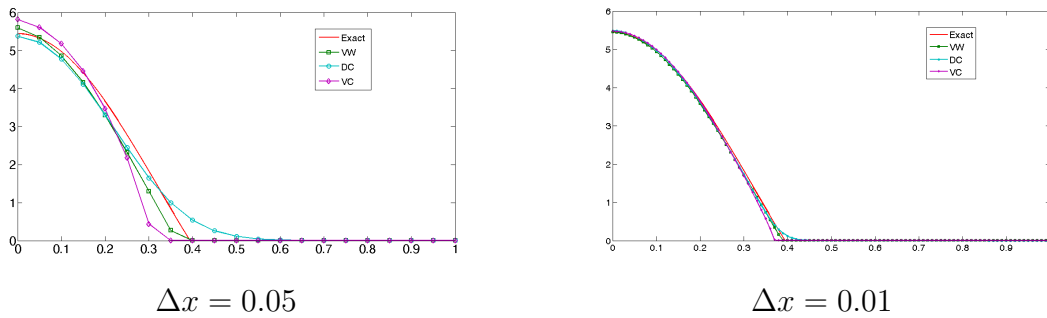


FIGURE 3.8 – Fonction ρ pour différents schémas.

2. avec les paramètres suivants : $p(\rho) = \rho^2$, $D = 0.1$, $a = 20$, $b = 10$, $\chi = 10$, $M = 1$ et $L = 1$.

3.2.1 Schéma de reconstruction aux interfaces

Nous définissons $U = (\rho, \rho u)^t$ le vecteur des deux inconnues, densité et moment et la partie hyperbolique du système (3.1) s'écrit alors

$$\partial_t U + \partial_x F(U) = S(U), \quad (3.8a)$$

où F est la fonction de flux et S le terme source :

$$F(U) = \begin{pmatrix} F^\rho \\ F^{\rho u} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p(\rho) \end{pmatrix}, \quad S(U) = \begin{pmatrix} 0 \\ -\alpha \rho u + \chi \rho \partial_x \phi \end{pmatrix}. \quad (3.8b)$$

Nous divisons l'intervalle $[0, L]$ en N cellules $C_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$, centrées aux nœuds x_i , $1 \leq i \leq N$. Nous supposons, par souci de simplification, que toutes les cellules ont la même longueur $\Delta x = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}$.

Nous considérons comme approximation semi-discrète $U_i(t)$ de la solution U sur la cellule C_i , la moyenne de U sur la cellule au temps $t > 0$, c'est-à-dire $\frac{1}{\Delta x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} U(x, t) dx$. Un schéma volume fini semi-discret pour l'équation (3.8) s'écrit alors sous la forme générale suivante :

$$\Delta x \frac{d}{dt} U_i(t) + \mathcal{F}_{i+1/2}(t) - \mathcal{F}_{i-1/2}(t) = S_i(t),$$

où $\mathcal{F}_{i\pm 1/2}(t)$ approche le flux $F(U(x_{i\pm 1/2}, t))$ aux points d'interface $x_{i\pm 1/2}$ et $S_i(t)$ est une discrétisation du terme source $S(U)$ dans la cellule C_i .

Discrétisation classique des parties flux et source. Un choix classique est de définir $\mathcal{F}_{i+1/2}(t) = \mathcal{F}(U_i(t), U_{i+1}(t))$, où $\mathcal{F} = \begin{pmatrix} \mathcal{F}^\rho \\ \mathcal{F}^{\rho u} \end{pmatrix}$ est n'importe quelle fonction de flux numérique C^1 consistante avec le problème homogène $\partial_t U + \partial_x F(U) = 0$, c'est-à-dire telle que

$$\mathcal{F}(U, U) = F(U) \text{ pour tout } U.$$

Une étude numérique sur les différents flux possibles pour la partie homogène nous a permis de comparer les solveurs de Roe, de HLL et de Suliciu adapté au vide décrits dans [25] et nous avons observé de bons résultats pour le traitement du vide avec les deux derniers.

Le terme source, quant à lui, est discrétisé par $S_i(t) = S(U_i(t))$, où la dérivée $\partial_x \phi$ est approchée par une formule centrée en espace $\partial_x \phi|_{C_i} \sim \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i-1}}{2\Delta x}$, où $\phi_{i\pm 1}$ est une approximation de la fonction ϕ aux points $x_{i\pm 1}$. Cependant, il est connu que ce genre d'approximation produit de larges erreurs au voisinage des états stationnaires.

Discrétisation par reconstruction aux interfaces. L'idée est alors d'équilibrer le flux et la source, c'est-à-dire de modifier les discrétisations précédentes en remplaçant les valeurs U_i et U_{i+1} par de nouvelles variables aux interfaces $U_{i+1/2}^\pm$ qui imposent une discrétisation exacte des solutions stationnaires du système. Les termes de flux s'écrivent alors comme $\mathcal{F}_{i+1/2} = \mathcal{F}(U_{i+1/2}^-, U_{i+1/2}^+)$ et le choix de ces variables aux interfaces sera précisé à la section 3.2.2.

Les termes sources sont également calculés dans l'esprit des méthodes USI (*Upwinding of the Source term at Interfaces*) introduites dans [24], puis reprises par [135, 106, 26] en décomposant $S_i = \mathcal{S}_{i+1/2}^- + \mathcal{S}_{i-1/2}^+$. On intègre alors la partie stationnaire du système (3.8), c'est-à-dire $\partial_x F(U) = S(U)$, entre $x_{i-1/2}$ et x_i (resp. x_i et $x_{i+1/2}$), en utilisant le fait que le moment ρu s'annule. On obtient ainsi :

$$\mathcal{S}_{i+1/2}^- = \begin{pmatrix} 0 \\ p(\rho_{i+1/2}^-) - p(\rho_i) \end{pmatrix}, \quad \mathcal{S}_{i-1/2}^+ = \begin{pmatrix} 0 \\ p(\rho_i) - p(\rho_{i-1/2}^+) \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

On remarque que la discrétisation du terme source n'est plus présente explicitement ni à travers le terme $\mathcal{F}_{i+1/2}$, ni à travers le terme source S_i , mais implicitement dans la discrétisation $U_{i+1/2}^\pm$, qui reste à définir.

Le schéma semi-discret s'écrit alors :

$$\Delta x \frac{d}{dt} U_i + \mathcal{F}(U_{i+1/2}^-, U_{i+1/2}^+) - \mathcal{F}(U_{i-1/2}^-, U_{i-1/2}^+) = \mathcal{S}_{i+1/2}^- + \mathcal{S}_{i-1/2}^+. \quad (3.10)$$

Discrétisation en temps. Soit un pas de temps Δt et des temps de discrétisation $t_n = n\Delta t$, $n \in \mathbb{N}$. En utilisant une approximation classique de la dérivée en temps, le schéma complètement discrétisé s'écrit

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}(U_{i+1/2}^{n,-}, U_{i+1/2}^{n,+}) - \mathcal{F}(U_{i-1/2}^{n,-}, U_{i-1/2}^{n,+})) + \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{S}_{i+1/2}^{n,-} + \mathcal{S}_{i-1/2}^{n,+}), \quad (3.11)$$

où U_i^n est une approximation de la solution U du système (3.8) sur la cellule C_i au temps t_n et $U_{i+1/2}^{n,\pm}$ sont les valeurs des variables aux interfaces au temps t_n .

3.2.2 Différentes reconstructions possibles

Passons maintenant à la définition des variables d'interface $U_{i+1/2}^\pm$ de telle sorte que le schéma vérifie les propriétés suivantes : consistance avec le système (3.8), conservation de la positivité de la solution, conservation des états stationnaires de (3.8) à vitesse nulle [26, 24, 135]. Cette construction permet d'améliorer la précision du schéma autour des états stationnaires. Dans la suite, l'expression explicite exacte des solutions stationnaires n'est pas nécessaire et il nous suffit de connaître l'équation vérifiée par celles-ci ; notre schéma n'est donc pas restreint au cas $\gamma = 2$.

On considère les états d'équilibre à vitesse constante, qui vérifient :

$$\partial_x u = 0 \text{ et } \partial_x p(\rho) = \chi \rho \partial_x \phi - \alpha \rho u. \quad (3.12)$$

La deuxième équation peut, après division par ρ , se réécrire en fonction de l'énergie interne $e(\rho)$ définie par $e'(\rho) = \frac{p(\rho)}{\rho^2}$, ce qui donne :

$$\partial_x u = 0 \text{ et } \partial_x (\Psi(\rho) - \chi \phi) = -\alpha u, \text{ avec } \Psi(\rho) = e(\rho) + \frac{p(\rho)}{\rho} = \frac{\kappa \gamma}{\gamma - 1} \rho^{\gamma-1}. \quad (3.13)$$

Les deux formes (3.12) et (3.13) donneront deux reconstructions différentes que l'on comparera à la section 3.4.2.

On calcule alors les valeurs des reconstructions aux interfaces $U_{i+1/2}^{n,-}$ (resp. $U_{i+1/2}^{n,+}$) en intégrant les équations précédentes sur $[x_i, x_{i+1/2}^-]$ (resp. $(x_{i+1/2}^+, x_{i+1}]$) [9]. A partir de l'équation $\partial_x u = 0$, on obtient que $u_{i+1/2}^{n,-} = u_i^n$ et que $u_{i+1/2}^{n,+} = u_{i+1}^n$. Ensuite, en intégrant l'équation (3.13), on obtient la reconstruction suivante, appelée *reconstruction E* :

$$u_{i+1/2}^{n,-} = u_i^n, \quad u_{i+1/2}^{n,+} = u_{i+1}^n \quad (3.14a)$$

et

$$\begin{cases} \Psi(\rho_{i+1/2}^{n,-}) = [\Psi(\rho_i^n) + \chi(\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_i^n) - \alpha(u_i^n)_+ \Delta x]_+, \\ \Psi(\rho_{i+1/2}^{n,+}) = [\Psi(\rho_{i+1}^n) + \chi(\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_{i+1}^n) + \alpha(u_{i+1}^n)_- \Delta x]_+, \end{cases} \quad (3.14b)$$

où $X_+ = \max(0, X)$, $X_- = \min(0, X)$.

En intégrant directement l'équation (3.12), on obtient une reconstruction différente, appelée *reconstruction P* :

$$u_{i+1/2}^{n,-} = u_i^n, \quad u_{i+1/2}^{n,+} = u_{i+1}^n \quad (3.15a)$$

et

$$\begin{cases} p(\rho_{i+1/2}^{n,-}) = \left[p(\rho_i^n) + \chi \bar{\rho}_{i+1/2}^n (\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_i^n) - \alpha \rho_i^n (u_i^n)_+ \Delta x \right]_+, \\ p(\rho_{i+1/2}^{n,+}) = \left[p(\rho_{i+1}^n) + \chi \bar{\rho}_{i+1/2}^n (\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_{i+1}^n) + \alpha \rho_{i+1}^n (u_{i+1}^n)_- \Delta x \right]_+, \end{cases} \quad (3.15b)$$

où $\bar{\rho}_{i+1/2}^n = \frac{1}{2}(\rho_i^n + \rho_{i+1}^n)$.

Dans ces deux reconstructions, les parties positive $(u_i^n)_+$ et négative $(u_{i+1}^n)_-$ permettent d'avoir la consistance du schéma. L'approximation de $\phi_{i+1/2}$ par $\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n)$ et la partie positive extérieure garantissent que la positivité de la densité est conservée. Ces propriétés sont énoncées à la section 3.2.3.

Remarque 3.3 *Il est difficile de définir des valeurs aux interfaces dans le cas de solutions stationnaires ne vérifiant pas la condition $\partial_x u = 0$. En effet, dans ce cas, les solutions stationnaires possèdent un moment pu constant et l'intégration amène à trouver les racines d'un polynôme de degré plus grand que 2 dès que $\gamma > 1$.*

Traitement implicite du terme de friction. Nous proposons dans ce paragraphe une variante du schéma (3.11), qui consiste à discrétiser implicitement le terme de friction, qui est un terme raide. En effet, dans les reconstructions précédentes (3.14) et (3.15), le terme de friction était inclus dans la définition des densités aux interfaces et donc traité de manière explicite. Concrètement, la 2^e équation de (3.10) est remplacée par :

$$\begin{aligned} (\rho u)_i^{n+1} = (\rho u)_i^n & - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathcal{F}^{\rho u}(\hat{U}_{i+1/2}^{n,-}, \hat{U}_{i+1/2}^{n,+}) - \mathcal{F}^{\rho u}(\hat{U}_{i-1/2}^{n,-}, \hat{U}_{i-1/2}^{n,+}) \right) \\ & + \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(p(\hat{\rho}_{i+1/2}^{n,-}) - p(\hat{\rho}_{i-1/2}^{n,+}) \right) - \alpha \Delta t (\rho u)_i^{n+1}, \end{aligned} \quad (3.16a)$$

avec

$$\hat{u}_{i+1/2}^{n,-} = u_i^n, \quad \hat{u}_{i+1/2}^{n,+} = u_{i+1}^n \quad (3.16b)$$

et les équations des valeurs aux interfaces, d'où le terme de friction disparaît, deviennent :

$$\begin{cases} \Psi(\hat{\rho}_{i+1/2}^{n,-}) = [\Psi(\rho_i^n) + \chi(\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_i^n)]_+, \\ \Psi(\hat{\rho}_{i+1/2}^{n,+}) = [\Psi(\rho_{i+1}^n) + \chi(\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_{i+1}^n)]_+, \end{cases} \quad (3.16c)$$

pour la reconstruction E et

$$\begin{cases} p(\hat{\rho}_{i+1/2}^{n,-}) = \left[p(\rho_i^n) + \chi \bar{\rho}_{i+1/2}^n (\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_i^n) \right]_+, \\ p(\hat{\rho}_{i+1/2}^{n,+}) = \left[p(\rho_{i+1}^n) + \chi \bar{\rho}_{i+1/2}^n (\min(\phi_i^n, \phi_{i+1}^n) - \phi_{i+1}^n) \right]_+, \end{cases} \quad (3.16d)$$

pour la reconstruction P.

Comparaison numérique des différentes reconstructions. Nous comparons maintenant les différentes reconstructions présentées plus haut dans le cas $\gamma = 3$. La figure 3.9 montre les fonctions ρ et ϕ (en haut) et la fonction ρu (en bas) pour les reconstructions suivantes³ :

3. avec les paramètres $\chi = 50$, $D = a = b = \alpha = \kappa = 1$ sur un intervalle de longueur $L = 1$. La donnée initiale est égale à $\rho_0(x) = 1 + \sin(4\pi|x - 0.25L|)$.

reconstruction P à gauche (équations (3.15) ou (3.16d)), reconstruction E à droite (équations (3.14) ou (3.16c)); le traitement implicite de la friction est représenté en rouge et le traitement explicite en bleu. Les deux reconstructions donnent, dans ce cas, des résultats similaires. La seule différence notable concerne le traitement explicite ou implicite du terme de friction : lorsque ce terme est traité implicitement, les approximations des fonctions ρ et ρu sont plus précises en moyenne, l'amélioration étant particulièrement visible pour les zones de vide.

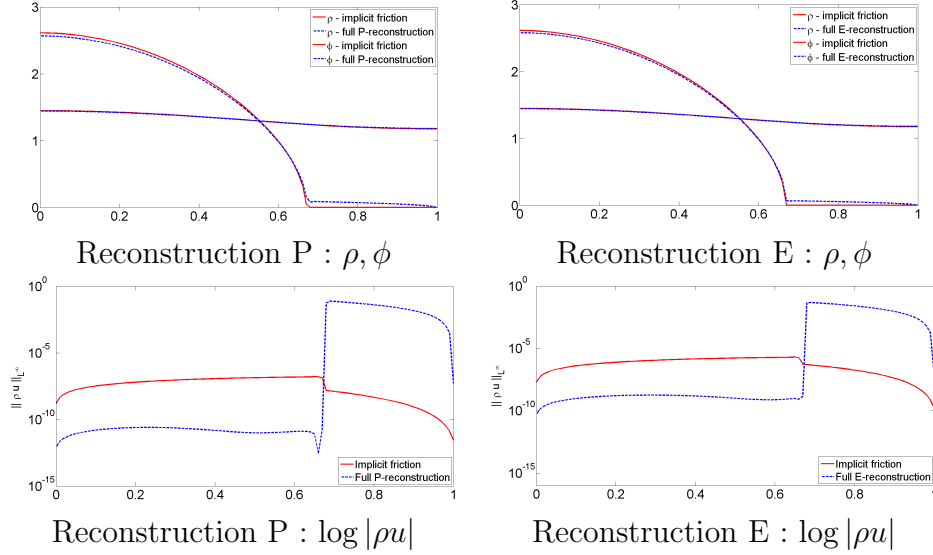


FIGURE 3.9 – En haut, les fonctions ρ et ϕ ; en bas, le logarithme de la fonction ρu . Comparaison entre les reconstructions P à droite, et la reconstruction E à gauche et entre le traitement implicite de la friction (en rouge) et explicite (en bleu).

3.2.3 Propriétés des schémas semi-discrets et discrets

Dans les deux théorèmes suivants, nous prouvons quelques propriétés du schéma semi-discret (3.10)-(3.9), puis du schéma complètement discrétisé (3.11) [Ra1].

Théorème 3.4 *Soit le système (3.8) sur l'intervalle $[0, L]$ avec les conditions aux bords (3.3). Soit $\mathcal{F} = (\mathcal{F}^\rho, \mathcal{F}^{\rho u})^t$ un flux numérique \mathcal{C}^1 , consistant et qui conserve la positivité de ρ pour la partie homogène du système (3.8), $\partial_t U + \partial_x F(U) = 0$. Le schéma aux volumes finis (3.10)-(3.9) avec la reconstruction (3.14) ou la reconstruction (3.15)*

- *est consistant avec (3.8) en dehors du vide,*
- *conserve la positivité de ρ ,*
- *conserve les états stationnaires définis par (3.12) avec une vitesse nulle.*

La preuve de la consistance se décompose en deux parties : la consistance de la partie flux vient de la consistance de \mathcal{F} et du développement au 1^{er} ordre de $U_{i+1/2}^\pm$, c'est-à-dire

$$U_{i+1/2}^- = U_i + O(\Delta x) \text{ et } U_{i+1/2}^+ = U_{i+1} + O(\Delta x).$$

La consistance de la partie source suit la définition donnée dans [135] et vient du développement au 2^e ordre du terme source discret, et donc de $U_{i+1/2}^\pm$, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} p(\rho_{i+1/2}^-) - p(\rho_{i+1/2}^+) &= p(\rho_i) + \rho_i(-\alpha(u_i)_+ + \frac{\chi}{2}(\partial_x \phi_i - |\partial_x \phi_i|))\Delta x \\ &\quad - p(\rho_{i+1}) - \rho_{i+1}(\alpha(u_{i+1})_- - \frac{\chi}{2}(\partial_x \phi_{i+1} + |\partial_x \phi_{i+1}|))\Delta x + O(\Delta x^2), \end{aligned}$$

ce qui donne, quand U_i et U_{i+1} tendent vers U et Δx tend vers 0,

$$\frac{1}{\Delta x} \left(p(\rho_{i+1/2}^-) - p(\rho_{i+1/2}^+) \right) \rightarrow -\alpha \rho (u_+ + u_-) + \chi \rho \partial_x \phi = -\alpha \rho u + \chi \rho \partial_x \phi.$$

La positivité de ρ , quant à elle, découle de la propriété de conservation de la positivité de \mathcal{F} pour la partie homogène.

Passons maintenant au schéma complètement discrétisé (3.11). Les propriétés de consistance et de conservation des états stationnaires restent vraies. Cependant, une condition de stabilité est nécessaire pour assurer la positivité de la densité. On suit pour cela la preuve de [9], en utilisant la notion de conservation de la positivité aux interfaces sous une condition CFL de stabilité [25], pour un système homogène :

Définition 3.5 (Positivité aux interfaces) *Un flux numérique $\mathcal{F} = (\mathcal{F}^\rho, \mathcal{F}^{\rho u})^t$ pour le système homogène $\partial_t U + \partial_x F(U) = 0$ conserve la positivité de ρ aux interfaces avec une vitesse numérique $\sigma(U_i^n, U_{i+1}^n) \geq 0$ si, lorsque*

$$\sigma(U_i^n, U_{i+1}^n) \Delta t \leq \Delta x,$$

alors

$$\begin{cases} \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}^\rho(U_i^n, U_{i+1}^n) - \rho_i^n u_i^n) \geq 0, \\ \rho_{i+1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\rho_{i+1}^n u_{i+1}^n - \mathcal{F}^\rho(U_i^n, U_{i+1}^n)) \geq 0. \end{cases}$$

En effet, prouver directement que le schéma (3.11) conserve un domaine convexe, ici le demi-plan positif, est rendu compliqué par le stencil à trois points du schéma (3.11). Considérer la notion de conservation du domaine aux interfaces revient à prouver seulement deux inégalités sur deux points chacune, ce qui simplifie beaucoup les calculs. Dans [25], il est prouvé que ces deux notions sont équivalentes sous une condition de stabilité légèrement plus restrictive, qui lie pas de temps, pas d'espace et vitesse numérique.

On a alors le résultat suivant :

Théorème 3.6 *Soit un flux \mathcal{F} pour la partie homogène qui préserve la positivité de ρ aux interfaces au sens de la définition 3.5. Alors, le schéma complètement discrétisé (3.11) avec la reconstruction (3.14) ou (3.15) préserve la positivité de ρ aux interfaces, c'est-à-dire : si la condition de stabilité suivante est vérifiée*

$$\sigma(U_{i+1/2}^{n,-}, U_{i+1/2}^{n,+}) \Delta t \leq \Delta x,$$

alors

$$\begin{cases} \rho_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\mathcal{F}^\rho(U_{i+1/2}^{n,-}, U_{i+1/2}^{n,+}) - \rho_i^n u_i^n) \geq 0, \\ \rho_{i+1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} (\rho_{i+1}^n u_{i+1}^n - \mathcal{F}^\rho(U_{i+1/2}^{n,-}, U_{i+1/2}^{n,+})) \geq 0. \end{cases}$$

3.3 Simulations numériques

Maintenant que nous avons un schéma adapté, qui traite précisément les zones de vide et les solutions stationnaires, nous l'utilisons pour explorer et comparer les solutions asymptotiques obtenues pour différents cas. On souligne que les mêmes résultats numériques sont obtenus avec un schéma de type solveur de Riemann modifié [15] dans [14]. L'idée principale est d'étudier la dépendance en γ pour déterminer quel γ donne des résultats les plus proches des expériences

de vasculogénèse citées dans l'introduction de ce chapitre. On regarde également pour cela la dépendance en la masse de la donnée initiale. On retrouve ces simulations dans l'article [Ra1].

Dépendance en γ . Le coefficient γ présent dans le terme de pression n'a pas une valeur claire dans un contexte biologique, contrairement au cas des gaz compressibles. Nous étudions à la figure 3.10 les solutions asymptotiques obtenues pour les fonctions ρ (à gauche) et ϕ (à droite) pour $\gamma = 2, 3, 4, 5$ ⁴ et une donnée initiale sinusoïdale. Nous observons alors que le nombre de bumps change en fonction des valeurs de γ : plus γ augmente, plus les forces de répulsion sont fortes là où la densité est élevée, et cela empêche la formation de grandes concentrations de cellules.

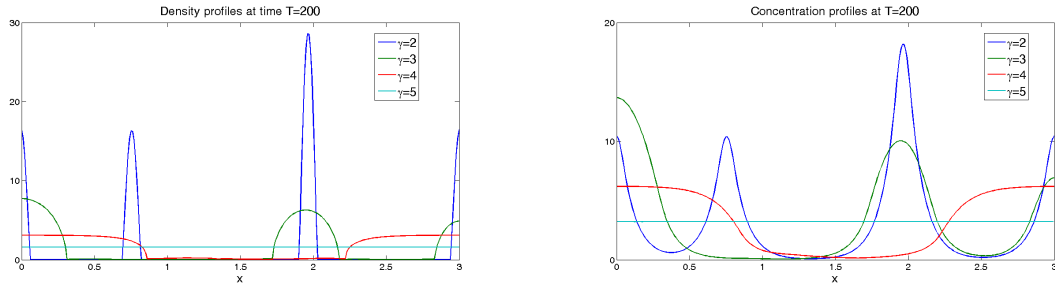


FIGURE 3.10 – Fonction ρ (à gauche) et ϕ (à droite) asymptotiques pour $\gamma = 2$ (bleu), 3 (vert), 4 (rouge), 5 (bleu cyan).

Dépendance en la masse. Ces expériences numériques sont guidées par les expériences biologiques de [147] détaillées dans l'introduction de ce chapitre et qui montrent des comportements dépendant de la masse initiale de cellules. Les régions de densité positive pourraient correspondre aux capillaires sanguins et devraient devenir plus larges pour de grandes masses de cellules. Enfin, au delà d'une masse critique, nous nous attendons à observer des solutions stationnaires constantes.

Nous comparons donc à la figure 3.11 les cas $\gamma = 2$ (à gauche) et $\gamma = 3$ (à droite) et nous représentons les états asymptotiques pour différentes valeurs initiales de la masse. Pour garder un profil initial le plus proche possible, nous considérons la même donnée initiale sinusoïdale⁵, que nous multiplions par un coefficient ξ qui augmente. Dans le cas $\gamma = 2$, le nombre de bumps et les supports des bumps restent constants, quelle que soit la masse, et seule la hauteur des bumps augmente avec la masse. En revanche, pour $\gamma = 3$, la dépendance en la masse est très différente et les configurations asymptotiques changent en fonction de la masse ; ceci semble montrer un comportement plus proche des expériences biologiques décrites dans [147].

3.4 Comparaison avec un système parabolique limite

Nous allons étudier maintenant comment se comporte le schéma numérique pour la limite temps long-forte friction du système (3.1), qui correspond à un système parabolique de type (1.2). Ce résultat s'inscrit dans la lignée des deux résultats suivants : dans [119], la vitesse du système d'Euler compressible sans chimiotactisme suit la loi de Darcy en temps long et dans [58], les auteurs analysent la convergence du système (3.1) vers des systèmes paraboliques pour plusieurs scalings. Le premier point intéressant est qu'il faut être attentif à la reconstruction utilisée pour trouver un schéma *asymptotic preserving*, comme en témoignent également les

4. avec les paramètres $\kappa = 1, D = 0.1, a = 20, b = 10, \chi = 10, L = 3$.

5. la donnée initiale vaut $\rho_0(x) = \xi (1 + \sin(4\pi|x - L/4|))$, $u_0 = 0$.

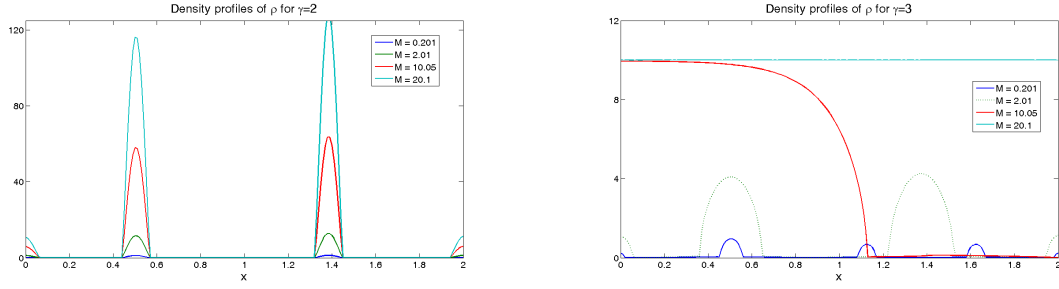


FIGURE 3.11 – Fonctions ρ asymptotiques pour $\gamma = 2$ (à gauche) et $\gamma = 3$ (à droite) pour différentes valeurs de la masse : $\xi = 0.1$ (bleu), 1 (vert), 5 (rouge), 10 (bleu cyan).

articles [40], [39] et [16]. On remarque aussi numériquement que les états asymptotiques des systèmes hyperboliques et paraboliques ne sont pas nécessairement les mêmes, contrairement à ce qu'on attend. Cette étude est présentée dans l'article [Ra2].

3.4.1 Limite temps long-forte friction du système hyperbolique

Soit $\varepsilon = \frac{1}{\alpha} > 0$, nous définissons les variables suivantes :

$$\tau = \varepsilon t, \quad v^\varepsilon(x, \tau) = \frac{u(x, t)}{\varepsilon}, \quad \rho^\varepsilon(x, \tau) = \rho(x, t), \quad \phi^\varepsilon(x, \tau) = \phi(x, t).$$

Le système (3.1) se réécrit à l'aide des nouvelles inconnues sous la forme :

$$\begin{cases} \partial_\tau \rho^\varepsilon + \partial_x (\rho^\varepsilon v^\varepsilon) = 0, \\ \varepsilon^2 \partial_\tau (\rho^\varepsilon v^\varepsilon) + \partial_x [\varepsilon^2 \rho^\varepsilon (v^\varepsilon)^2 + p(\rho^\varepsilon)] = \chi \rho^\varepsilon \partial_x \phi^\varepsilon - \rho^\varepsilon v^\varepsilon, \\ \varepsilon \partial_\tau \phi^\varepsilon = D \partial_{xx} \phi^\varepsilon + a \rho^\varepsilon - b \phi^\varepsilon. \end{cases}$$

Quand $\varepsilon \rightarrow 0$, ce qui correspond à la limite temps long-forte friction, nous obtenons à la limite le système parabolique-elliptique suivant, c'est-à-dire le système (1.2) avec $\delta = 0$ (cf. [58] pour plus de détails) :

$$\begin{cases} \partial_\tau \rho = \partial_x [\partial_x p(\rho) - \chi \rho \partial_x \phi], \\ 0 = D \partial_{xx} \phi + a \rho - b \phi. \end{cases} \quad (3.17)$$

3.4.2 Propriété *asymptotic preserving* du schéma

Dans cette section, nous étudions la propriété *asymptotic preserving* du schéma numérique (3.10) combiné avec la reconstruction (3.14) ou (3.15) pour le système (3.1), c'est-à-dire nous cherchons à savoir si le schéma limite obtenu pour $\varepsilon \rightarrow 0$ est consistant avec l'équation limite (3.17), en s'inspirant de [26].

Plus précisément, on dit que le flux numérique est *asymptotic preserving* à la limite temps long-forte friction si on obtient le développement suivant pour la première composante du flux numérique :

$$\mathcal{F}^\rho(U_{i+1/2}^{\varepsilon, n, -}, U_{i+1/2}^{\varepsilon, n, +}) = \mathcal{F}_{i+1/2}^{n, \text{Par}} + O(\varepsilon \Delta x) + O(\varepsilon^2),$$

où $\mathcal{F}_{i+1/2}^{n, \text{Par}}$ est un flux numérique conservatif et consistant avec l'équation parabolique :

$$\partial_t \rho = \partial_x (\partial_x p(\rho) - \chi \rho \partial_x \phi).$$

Le théorème 3.8 montre que cette propriété dépend de la reconstruction choisie.

Un point technique de la preuve du théorème nécessite la propriété suivante sur le flux numérique, que nous appelons propriété de consistance forte :

Définition 3.7 (Consistance forte) *Un flux numérique \mathcal{F} consistant avec le flux F défini à l'équation (3.8b) est fortement consistant si il vérifie les deux conditions suivantes :*

- si $\mathcal{F}^{\rho u}(r, 0, R, 0) = p(r)$ alors $r = R$;
- si $\mathcal{F}^{\rho u}(r, 0, R, 0) = p(R)$ alors $r = R$.

Cette condition découle d'une condition de [26] et est vérifiée, en particulier, pour les flux HLL, HLL-Roe et le flux de relaxation de Suliciu adapté au vide, tous détaillés dans [25].

Nous pouvons alors passer à la limite dans le schéma pour le système hyperbolique et obtenir les limites suivantes[Ra2] :

Théorème 3.8 *Soit un flux numérique \mathcal{F} consistant avec le flux F défini à l'équation (3.8b) et fortement consistant au sens de la définition 3.7. On suppose que l'on a les développements suivants pour $\rho_i^{\varepsilon,n}$ et $u_i^{\varepsilon,n}$ quand $\varepsilon \rightarrow 0$:*

$$\rho_i^{\varepsilon,n} = r_i^n + \varepsilon r_i^{n,(1)} + O(\varepsilon^2), \quad u_i^{\varepsilon,n} = \varepsilon v_i^{\varepsilon,n} = \varepsilon v_i^{n,(0)} + \varepsilon^2 v_i^{n,(1)} + O(\varepsilon^3).$$

Alors, on a

$$\mathcal{F}^\rho(U_{i+1/2}^{\varepsilon,n,-}, U_{i+1/2}^{\varepsilon,n,+}) = -\frac{1}{\Delta x} (p(r_{i+1}) - p(r_i) + \chi \bar{r}_{i+1/2}(\phi_i - \phi_{i+1})) + O(\varepsilon \Delta x) + O(\varepsilon^2)$$

dans le cas de la reconstruction P et

$$\mathcal{F}^\rho(U_{i+1/2}^{\varepsilon,n,-}, U_{i+1/2}^{\varepsilon,n,+}) = -\frac{r_i}{\Delta x} (\Psi(r_{i+1}) - \Psi(r_i) + \chi(\phi_i - \phi_{i+1})) + O(\varepsilon \Delta x) + O(\varepsilon^2)$$

dans le cas de la reconstruction E .

Par conséquent, dans le cas de la pression des gaz isentropiques (3.2), seule la reconstruction P est asymptotic preserving à la limite temps long-forte friction.

Les détails de la preuve sont donnés dans [Ra2]. D'après (3.13), on remarque que le second point du théorème se réécrit ainsi :

$$\mathcal{F}^\rho(U_{i+1/2}^{\varepsilon,n,-}, U_{i+1/2}^{\varepsilon,n,+}) = -\frac{r_i}{\Delta x} \left(\frac{\kappa\gamma}{\gamma-1} (r_{i+1}^{\gamma-1} - r_i^{\gamma-1}) + \chi(\phi_i - \phi_{i+1}) \right) + O(\varepsilon \Delta x) + O(\varepsilon^2).$$

dans le cas de la reconstruction E et de la loi de pression pour les gaz isentropiques (3.2). Cela signifie que, en utilisant la reconstruction E (3.14), on obtient à la limite temps long-forte friction, un schéma numérique pour le système parabolique-elliptique (3.17) qui est non conservatif et qui a un coefficient de diffusion erroné. En revanche, la reconstruction P (3.15) utilisée avec le schéma numérique (3.10) est consistante avec le schéma conservatif du second ordre pour le modèle de type Keller-Segel (3.17). Dans la suite, nous utiliserons donc de préférence la reconstruction P pour effectuer nos simulations numériques.

3.4.3 Simulations numériques

Schéma pour le système parabolique (3.17). L'équation linéaire de réaction-diffusion pour ϕ ne pose pas de problème particulier et est résolue comme pour le système hyperbolique (3.1). En revanche, à cause de la présence de vide, un schéma classique centré du second ordre en espace ne conserve pas la positivité de ρ [26]. On utilise alors un schéma de relaxation, basé sur

une approximation diffusive BGK [7]. Cette technique permet de conserver la positivité à l'aide d'une viscosité artificielle et garantit la stabilité du schéma, sous une condition CFL adaptée, en séparant de manière adéquate les termes linéaires et non-linéaires.

Nous présentons ici deux résultats numériques, le premier avec $\gamma = 2$, le deuxième avec $\gamma = 3$. Le premier⁶, présenté à la figure 3.12, montre les solutions asymptotiques du système hyperbolique (3.1) et du système parabolique (3.17) au temps $T = 150$. Nous remarquons que le comportement asymptotique des systèmes parabolique et hyperbolique est différent : pour le système hyperbolique, la condition initiale est stable, alors que pour le système parabolique, les 2 demi-bumps s'agrègent autour de $t = 10$.

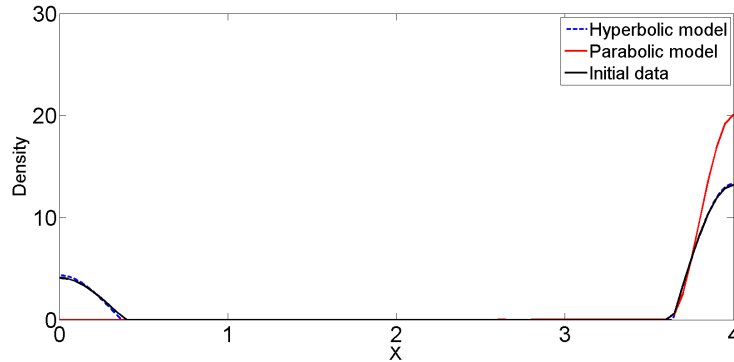


FIGURE 3.12 – Solution asymptotique ρ pour le système parabolique (3.17) et pour le système hyperbolique (3.1).

Nous arrivons à la même conclusion avec le 2^e test⁷ présenté à la figure 3.13. Nous observons ici que l'évolution initiale du système hyperbolique est plus rapide et que les agrégations de bumps se font entre $t = 10$ et $t = 20$. En revanche, dans le cas parabolique, on observe des configurations métastables [94]. La configuration multi-bumps reste inchangée pendant un long moment jusqu'à environ $t = 10$ où apparaît une transition rapide vers une configuration " 1 bump et 1 demi-bump " ; cette situation reste stable jusqu'à environ $t = 300$ où une autre transition apparaît et seul 1 demi-bump reste. Asymptotiquement, il ne reste qu'1 bump et 2 demi-bumps dans le cas hyperbolique et 1 demi-bump dans le cas parabolique.

Conclusion

En conclusion, nous avons étudié dans ce chapitre le modèle de vasculogénèse (3.1) proposé dans [147] en dimension 1. Nous avons présenté une classification complète des solutions stationnaires présentant une ou plusieurs zones de vide et nous avons montré que pour une longueur de domaine assez grande, il existe une infinité de telles solutions à masse fixée. Dans le cas d'un domaine borné, la solution composée d'1 demi-bump est celle d'énergie minimale. Les simulations numériques, obtenues à partir d'un schéma well-balanced, montrent que la stabilité de toutes ces solutions n'est pas du tout évidente.

Enfin, après avoir sélectionné un schéma *asymptotic preserving*, nous avons étudié numériquement la limite parabolique, obtenue pas une limite temps long-forte friction dans le modèle

6. Les paramètres du système, à savoir $\gamma = 2$, $\chi = 50$, $D = a = b = \alpha = \kappa = 1$ et les données initiales sont les mêmes.

7. Les paramètres sont égaux à $\chi = 10$, $D = 0.1$, $a = 20$, $b = 10$, $\kappa = \alpha = 1$ et $\gamma = 3$ et les données initiales sont $\rho_0(x) = 1.5 + \sin(4\pi|x - 0.25L|)$ et $\phi_0(x) = 0$.

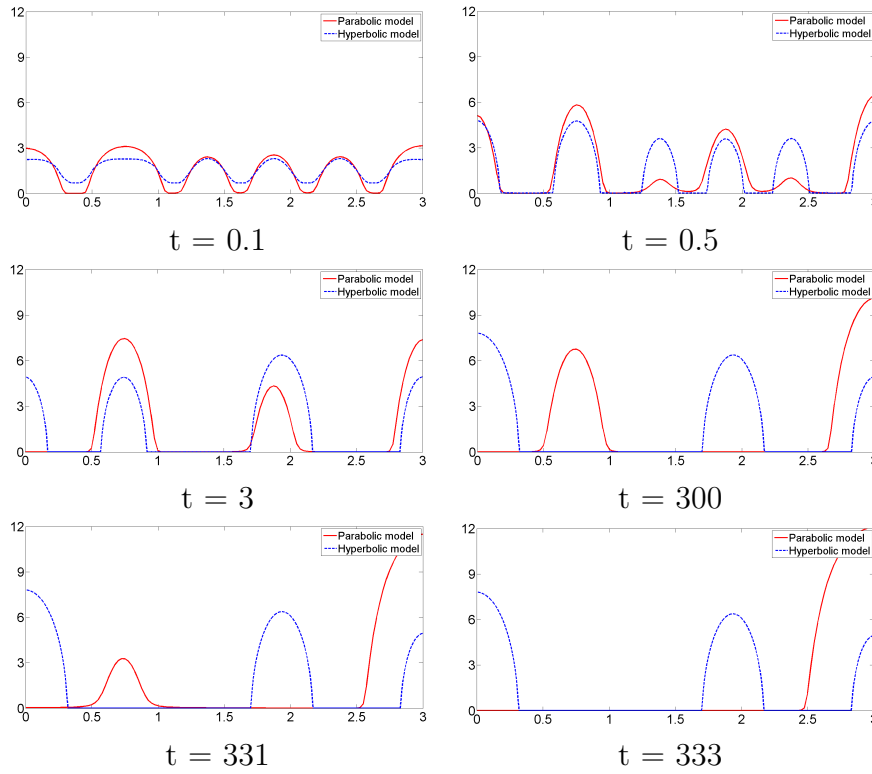


FIGURE 3.13 – Fonction ρ pour différents temps en comparant les systèmes (3.1) et (3.17).

hyperbolique. On observe alors que pour certains jeux de paramètres les solutions asymptotiques hyperbolique et parabolique diffèrent, ce qui reste encore inexpliqué.

Chapitre 4

Applications des modèles de chimiotactisme

Sommaire

4.1	Modèle de chimiotactisme sur réseaux	58
	Contexte biologique	58
4.1.1	Modèle et conditions aux nœuds	59
4.1.2	Adaptation du schéma AHO	62
4.1.3	Résultats numériques	63
4.2	Modèles de poursuite-évasion	63
4.2.1	Une hiérarchie de modèles	65
4.2.2	Simulations numériques	66
4.2.3	Un résultat d'existence globale	68
	Conclusion	69

Dans ce chapitre, nous appliquons les modèles de chimiotactisme étudiés précédemment à deux situations distinctes.

La première application vient du phénomène de cicatrisation, au cours duquel les fibroblastes se déplacent sur des fibres via un phénomène de chimiotactisme. Ce projet est né de discussions avec des chercheurs du laboratoire d'ingénierie tissulaire de l'Université Campus Bio-Medico de Rome, dont A. Rainer, qui cherchent à comprendre comment construire des réseaux optimaux de fibres artificielles afin d'améliorer le déplacement de fibroblastes. De ces discussions, nous avons obtenu de nombreux renseignements sur le comportement des fibroblastes, ce qui nous a permis d'affiner le modèle présenté dans ce chapitre, en particulier les conditions de transmission aux nœuds.

Dans le modèle présenté ici, on considère un réseau où les arcs représentent les fibres et les nœuds leurs points d'intersection. Le mouvement des fibroblastes sur chaque arc est décrit par le modèle hyperbolique semi-linéaire 1D de chimiotactisme étudié au chapitre 2. Nous voyons donc ici l'intérêt d'étudier des modèles en dimension 1 qui suffisent et peuvent être facilement utilisés pour un couplage sur un graphe. Cependant, pour compléter le modèle, il faut aussi introduire des conditions de transmission aux nœuds aussi bien pour les densités ρ que pour la concentration ϕ . Le schéma d'ordre élevé asymptotique du chapitre 2 a ensuite été adapté aux conditions de transmission ainsi trouvées.

Une deuxième application concerne la proposition d'une hiérarchie de modèles pour le problème de poursuite-évasion où une ou plusieurs proies sont poursuivies par des chasseurs. De nombreux modèles ont été développés pour cette problématique et nous proposons ici d'utiliser les modèles de chimiotactisme déjà cités et étudiés, un avec un noyau attractif, les chasseurs étant attirés par les proies, l'autre avec un noyau répulsif, les proies étant repoussées par les chasseurs. Nous proposons donc différents types de modèles aussi bien d'équations différentielles que d'équations aux dérivées partielles, des simulations numériques liées et un théorème d'existence globale qui montre que le phénomène d'explosion du système de Keller-Segel ne se retrouve pas avec ce couplage aux effets antagonistes.

Ce chapitre correspond aux articles [Ra3], [Rp1] et [Rs3].

4.1 Modèle de chimiotactisme sur réseaux

Contexte biologique

Nous étudions ici le phénomène de cicatrisation et plus particulièrement la phase de migration des fibroblastes sous l'effet du chimiotactisme. La cicatrisation d'une blessure se déroule en plusieurs phases. La première phase est une réponse inflammatoire de l'organisme qui élimine les corps étrangers ; pendant cette phase, un caillot sanguin se forme. Ensuite, une phase d'angiogénèse permet la formation de nouveaux vaisseaux sanguins qui alimenteront les cellules, en oxygène notamment. Il y a alors une phase active de migration de cellules du tissu conjonctif et en particulier de fibroblastes, pendant laquelle le caillot devient une croûte, qui formera finalement la cicatrice. Elle est finalement suivie d'une phase de prolifération, puis de maturation qui permet une reconstruction totale des différentes couches de la peau.

Le rôle des fibroblastes est important lors de ce processus, puisqu'ils sécrètent le collagène et la matrice extra-cellulaire, c'est-à-dire les protéines qui forment les fibres du tissu conjonctif. Le nouveau tissu ainsi formé diffère du tissu original et est moins fonctionnel que le tissu initial. Il est à noter que la matrice extra-cellulaire permet aux fibroblastes qui la créent de se déplacer et d'arriver jusqu'à la lésion, mais aussi facilite l'adhésion des cellules et leur organisation en tissu. En particulier, les cellules s'alignent le long des fibres. Enfin, la production et la prolifération des fibroblastes sont activées grâce à des facteurs de croissance, les FGF, que les fibroblastes

produisent eux-mêmes.

Dans le domaine de l'ingénierie tissulaire [118, 88, 151], un tissu artificiel, dit scaffold, de fibres polymériques croisées, est construit pour réparer le tissu endommagé et permettre le déplacement des cellules. Le scaffold est ensuite posé à l'intérieur du corps et les fibroblastes se déplacent sur ces fibres, sans avoir à les produire, cf figure 4.1. Il y a deux avantages à cela : accélérer le déplacement des fibroblastes, qui ont déjà un support, et minimiser la taille de la cicatrice en obligeant les cellules à se déplacer selon un réseau donné [151].

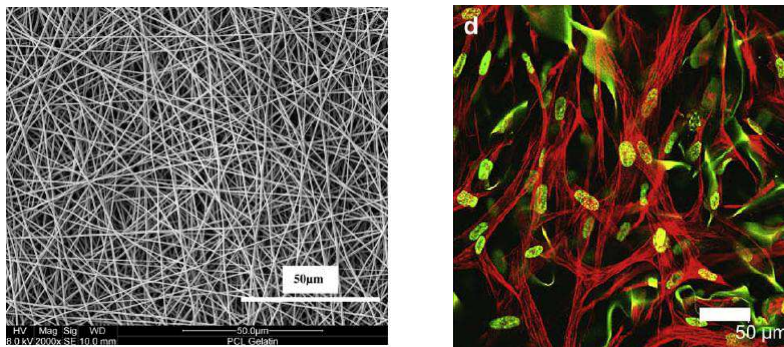


FIGURE 4.1 – A gauche, exemple de scaffold artificiel [46]. A droite, fibroblastes se déplaçant sur un scaffold [118].

Dans ce chapitre, nous nous concentrons donc sur la modélisation de ce dernier phénomène, à savoir le déplacement des fibroblastes le long d'un scaffold pré-construit. Plus précisément, nous modélisons le réseau de fibres qu'est le scaffold par un graphe, chaque arc du graphe représentant une fibre et les nœuds du graphe représentant les points d'intersection des fibres. Sur chaque arc du graphe, les fibroblastes se déplacent, en étant soumis au chimiotactisme. Des règles de passage doivent être définies à chaque nœud en accord avec les phénomènes biologiques observés.

Les paramètres biophysiques et biochimiques qui affectent la mobilité des cellules en 3D restent peu connus [88]. Cependant, les interactions aux nœuds affectent la persistance directionnelle, ainsi que la vitesse des cellules, ce qui donne un nouveau mécanisme de contrôle de mobilité des cellules en utilisant la structure extra-cellulaire. Nous espérons donc que la modélisation mathématique pourrait jouer un rôle crucial via une meilleure compréhension du phénomène et une optimisation des scaffolds construits.

Dans cette section, nous proposons donc des équations aux dérivées partielles posées sur les arcs d'un graphe et couplées entre elles avec des conditions de transmission adaptées et originales, de continuité du flux et non continuité de la densité. Des conditions pour conserver la masse sont données. Le schéma employé est ensuite adapté au cas du réseau et la technique pour trouver des conditions aux bords discrètes du chapitre 2 est généralisée au cas des conditions de transmission. Le cas de la partie hyperbolique de (2.1) sur un graphe a été traité dans [Rp1] et ensuite étendu au système complet hyperbolique-parabolique (2.1) sur un graphe dans [Ra3].

4.1.1 Modèle et conditions aux nœuds

On se fixe un réseau $G = (\mathcal{N}, \mathcal{A})$ composé de deux ensembles, un ensemble de nœuds \mathcal{N} et un ensemble de N arcs \mathcal{A} , tels qu'un arc connecte deux nœuds. Le graphe n'est pas orienté, mais on doit fixer une direction (artificielle) pour définir le signe des vitesses en jeu. Il y a alors deux types d'intervalles à un nœud $p \in \mathcal{N}$: les arcs entrants, dont l'ensemble est noté E_p , et

les arcs sortants, dont l'ensemble est noté S_p . Un exemple est donné à la figure 4.2 où $1, 2 \in E$ et $3, 4 \in S$. On note également E_{out} et S_{out} les arcs entrants et sortants des bords du réseau.

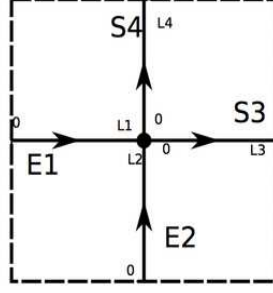


FIGURE 4.2 – Exemple de réseau

On considère donc l'équation semi-linéaire (2.1) déjà étudiée au chapitre 2 sous la forme diagonalisée, qui permet de différencier les cellules selon leur sens de parcours,

$$\begin{cases} \partial_t \rho^+ + \lambda \partial_x \rho^+ = \frac{1}{2\lambda} ((\partial_x \phi - \lambda) \rho^+ + (\partial_x \phi + \lambda) \rho^-), \\ \partial_t \rho^- - \lambda \partial_x \rho^- = -\frac{1}{2\lambda} ((\partial_x \phi - \lambda) \rho^+ + (\partial_x \phi + \lambda) \rho^-), \\ \partial_t \phi - D \partial_{xx} \phi = a(\rho^+ + \rho^-) - b\phi, \end{cases} \quad (4.1)$$

et on note ρ_i^\pm et ϕ_i les valeurs correspondantes sur le i^e arc. On remarque que les cellules vont toutes à la même vitesse sur un arc donné, on la note λ_i .

Nous insistons ici sur le fait que le modèle semi-linéaire 1D étudié au chapitre 2 est particulièrement adapté à cette étude, malgré ses limites mises en évidence à la sous-section 2.3.2. En effet, même si un modèle 1D n'est pas très réaliste dans un objectif de modélisation, il s'agit de la dimension adaptée pour l'étude des EDPs sur un réseau tel qu'on le considère ici. De plus, l'étude des conditions de transmission qui est faite à partir de maintenant n'est possible que dans le contexte d'un modèle avec une partie homogène linéaire et elle demanderait des adaptations importantes pour passer à un modèle quasi-linéaire.

Les conditions aux bords extérieurs pour les arcs ayant une extrémité au bord extérieur sont les mêmes que celles pour le système sur un intervalle classique :

$$\rho_i^+ = \rho_i^- \text{ (qui est équivalent à } v_i = 0 \text{) si } i \in E_{out} \text{ ou } S_{out}, \quad (4.2)$$

c'est-à-dire que l'on considère que les flux de cellules sont nuls sur les bords.

Conditions de transmission aux nœuds. Pour l'instant, les fonctions ρ_i^\pm et ϕ_i définies sur les différents arcs ne sont pas couplées, elles vont l'être par les conditions de transmission aux nœuds. Au nœud $p \in \mathcal{N}$, on pose les conditions de transmission suivantes, qui dépendent des caractéristiques entrantes et sortantes au nœud :

$$\begin{cases} \rho_i^-(L_i, t) = \sum_{j \in E_p} \xi_{i,j} \rho_j^+(L_j, t) + \sum_{j \in S_p} \xi_{i,j} \rho_j^-(0, t), \text{ si } i \in E_p, \\ \rho_i^+(0, t) = \sum_{j \in E_p} \xi_{i,j} \rho_j^+(L_j, t) + \sum_{j \in S_p} \xi_{i,j} \rho_j^-(0, t), \text{ si } i \in S_p, \end{cases} \quad (4.3)$$

où les constantes $\xi_{i,j} \in [0, 1]$ sont les coefficients de transmission, c'est-à-dire la probabilité pour une cellule au nœud p de passer de l'arc i à l'arc j , en incluant aussi la possibilité de faire

demi-tour. Pour résumer, pour un arc entrant (resp. sortant), la valeur de ρ_i^+ (resp. ρ_i^-) à un nœud est obtenue par les équations du système et la valeur de ρ_i^- (resp. ρ_i^+) par les conditions de transmission.

Cependant, on aimerait avoir la continuité des flux aux nœuds, ce qui signifie que l'on ne peut ni gagner, ni perdre de cellules au passage d'un nœud. Nous ajoutons alors la condition suivante

$$\sum_{i \in E_p \cup S_p} \lambda_i \xi_{i,j} = \lambda_j, \quad j \in E_p \cup S_p, \quad (4.4)$$

qui implique la conservation du flux au nœud p , à savoir

$$\sum_{i \in E_p} \lambda_i (\rho_i^+(L_i, t) - \rho_i^-(L_i, t)) = \sum_{i \in S_p} \lambda_i (\rho_i^+(0, t) - \rho_i^-(0, t)).$$

Cette condition implique aussi que la masse globale est conservée avec le temps :

$$\sum_{i=1}^N \int_0^{L_i} \rho_i(x, t) dx = \sum_{i=1}^N \int_0^{L_i} \rho_i(x, 0) dx, \quad \text{pour tout } t > 0. \quad (4.5)$$

Si on veut ajouter à ceci une propriété de dissipation pour la partie hyperbolique du système sans source, afin d'obtenir une décroissance de l'énergie, on est amené à considérer la condition supplémentaire suivante :

$$\sum_{j \in E_p \cup S_p} \xi_{i,j} = 1 \quad \text{pour tout } i \in E_p \cup S_p. \quad (4.6)$$

Conditions de transmission et aux bords pour ϕ . Sur les bords extérieurs, nous posons les conditions aux bords classiques vues au chapitre 2 :

$$\partial_x \phi_i = 0 \quad \text{si } i \in E_{out} \text{ ou } S_{out}. \quad (4.7)$$

Encore une fois, nous nous contentons d'imposer la continuité du flux au nœud p , en utilisant la condition de perméabilité de Kedem-Katchalsky [107], proposée dans le cas d'un flux à travers une membrane :

$$D_i \partial_n \phi_i = \sum_{j \in E_p \cup S_p} \kappa_{i,j} (\phi_j - \phi_i), \quad i \in E_p \cup S_p, \quad (4.8)$$

où les $\kappa_{i,j}$ sont des coefficients positifs, ce qui garantit la décroissance de l'énergie de la partie parabolique sans source. La conservation des flux au nœud $\sum_{i \in E_p \cup S_p} D_i \partial_n \phi_i = 0$ est vérifiée si

$$\kappa_{i,j} = \kappa_{j,i}, \quad i, j = 1, \dots, N.$$

L'étude des solutions stationnaires du système est trop compliquée, mais on peut citer le résultat suivant concernant les solutions stationnaires constantes [Ra3] :

Proposition 4.1 *Soit un réseau général $G = (\mathcal{N}, \mathcal{A})$ et le système (4.1) sur chaque arc du réseau avec les conditions aux bords et de transmission (4.2), (4.3), (4.7) et (4.8).*

(i) *Pour des valeurs quelconques des coefficients de transmission $\xi_{i,j}$ vérifiant (4.4), il n'y a pas de solution stationnaire constante par arcs.*

(ii) *Pour le cas particulier des coefficients de transmission $\xi_{i,j}$ vérifiant les relations de dissipation (4.4) et (4.6) et des ratios a_i/b_i tous égaux, alors il existe une solution stationnaire constante par arcs, définie à un paramètre près.*

Résultats numériques. Nous représentons à la figure 4.3 les solutions asymptotiques pour un réseau composé de deux arcs et un nœud. À gauche¹, nous utilisons des coefficients vérifiant la condition de dissipation (4.6), c'est-à-dire les hypothèses du point (ii) de la proposition 4.1 et à droite,², des coefficients vérifiant seulement le point (i) de la proposition 4.1. Les résultats obtenus sont cohérents avec la proposition 4.1 : à gauche, on obtient asymptotiquement une solution stationnaire constante par arcs, alors qu'à droite, nous obtenons des solutions non constantes. Dans les deux cas, le flux est nul sur les deux arcs et n'est pas représenté ici.

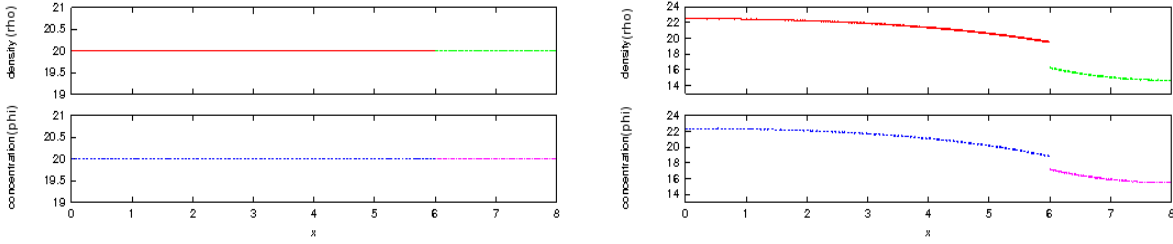


FIGURE 4.3 – Solutions asymptotiques ρ (en haut) et ϕ (en bas) pour un réseau avec 2 arcs et 1 nœud. À gauche, avec des coefficients dissipatifs et à droite, avec des coefficients non-dissipatifs.

Remarque 4.2 Dans [Rp1], une première étude est présentée où le terme $\partial_x \phi$ de la partie hyperbolique de (4.1) est remplacé par une constante, par souci de simplification, et où l'équation parabolique n'apparaît donc pas. Les résultats sur les solutions stationnaires et les simulations numériques sont très différents de ce qui est présenté ici, montrant une fois de plus l'importance et la difficulté du couplage hyperbolique-parabolique étudié.

4.1.2 Adaptation du schéma AHO

Pour obtenir un schéma fiable, nous partons du schéma décrit à la section 2.2 et nous l'utilisons sur chaque arc. On utilise alors la notation suivante : $w_i^{n,j}$ est la discrétisation sur la grille au temps t_n et au point x_i^j d'une fonction w_i , $i = 1, \dots, N$ sur le i^e arc pour $j = 0, \dots, M_i + 1$ et $n \geq 0$.

Les conditions aux bords liées aux nœuds extérieurs sont les mêmes que celles dérivées à l'équation (2.13), en plus de (2.12). Là encore, les conditions aux bords vont être données dans les variables (ρ, v) , alors que le schéma est écrit dans les variables (ρ^+, ρ^-) . On utilise également une version discrète des conditions de transmission (4.3) au nœud p :

$$\begin{cases} \rho_{-,i}^{n,M_i+1} = \sum_{j \in I_p} \xi_{i,j} \rho_{+,j}^{n,M_j+1} + \sum_{j \in O_p} \xi_{i,j} \rho_{-,j}^{n,0}, & \text{si } i \in E_p, \\ \rho_{+,i}^{n,0} = \sum_{j \in I_p} \xi_{i,j} \rho_{+,j}^{n,M_j+1} + \sum_{j \in O_p} \xi_{i,j} \rho_{-,j}^{n,0}, & \text{si } i \in S_p. \end{cases} \quad (4.9)$$

Cependant, ces relations relient toutes les inconnues les unes avec les autres. Nous en sommes à 2 équations par arc, alors qu'il nous en faut 4 pour calculer les solutions. Les 2 conditions manquantes sont obtenues comme suit : sur les bords du domaine, on retrouve les conditions calculées à l'équation (2.13). À l'intérieur du domaine, nous calculons la différence entre deux temps successifs de la masse totale définie, cette fois, à l'équation (4.5). En annulant cette

1. À gauche, paramètres : $\lambda_1 = 5, \lambda_2 = 4, \xi_{1,1} = 0.8, \xi_{2,1} = 0.25, \xi_{1,2} = 0.2, \xi_{2,2} = 0.75$.

2. À droite, paramètres : $\lambda_1 = 5, \lambda_2 = 4, \xi_{1,1} = 0.8, \xi_{2,1} = 0.25, \xi_{1,2} = 0.24, \xi_{2,2} = 0.7$.

quantité, nous obtenons les deux conditions manquantes, que nous n'écrivons pas ici, c'est-à-dire si $i \in E_p$ (resp. $i \in S_p$), on obtient $\rho_{+,i}^{n+1,M_i+1}$ (resp. $\rho_{-,i}^{n+1,0}$) en fonction des $\rho_{\pm,i}^{n+1,M_i(+1)}$ (resp. $\rho_{\pm,i}^{n(+1),0}$). Ces dernières quantités sont faciles à calculer car elles ne dépendent que de valeurs au temps précédent et ce sont elles qui interviennent dans le membre de gauche de l'équation (4.9), nous permettant donc de calculer ensuite la suite des données nécessaires aux nœuds.

Maintenant que l'on a bien 4 conditions aux bords discrètes par arc, comme nécessaire pour la mise en place du schéma AHO, nous pouvons étudier la consistance de ces conditions avec les conditions aux bords. Nous obtenons la consistance des dernières conditions calculées sous la relation étonnante suivante, qui relie par une égalité les pas de temps et d'espace sur chaque arc : $\Delta x_i = 2\Delta t\lambda_i$.

La discrétisation parabolique sur chaque arc est classique, mais la discrétisation des conditions de transmission (4.8) l'est moins car ces conditions couplent toutes les inconnues $\phi_i^{n,j}$ sur tous les arcs, ce qui nous amène à résoudre un système linéaire à chaque pas de temps.

4.1.3 Résultats numériques

Nous étudions ici, à l'aide du schéma du paragraphe précédent, un réseau composé de 4 nœuds et 12 arcs représenté à la figure 4.4. On choisit des coefficients de transmission non dissi-

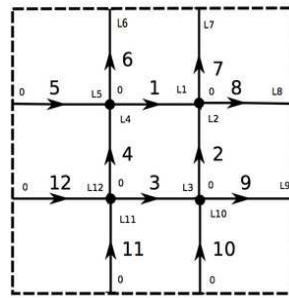


FIGURE 4.4 – Exemple de réseau composé de 12 arcs et de 4 nœuds.

patifs, mais satisfaisant la condition (4.4). Dans ce cas, nous ne savons pas ce que sera la solution asymptotique, ni quelles sont les solutions stationnaires du système. Les densités³ asymptotiques sont représentées nœud par nœud à la figure 4.5, et les flux à la figure 4.6. Les flux sont bien stabilisés, comme le prévoit le schéma et nous remarquons que les flux des arcs connectés aux nœuds extérieurs s'annulent, alors que les flux des arcs intérieurs au réseau sont constants et tous égaux au signe près.

4.2 Modèles de poursuite-évasion

Dans cette section, nous proposons une hiérarchie de modèles proposée dans [Rs3] d'équations différentielles et d'EDPs pour décrire le phénomène de poursuite-évasion. La démarche est assez similaire à celle de [34] pour les modèles d'essaim, qui ne font intervenir qu'une seule population. Des simulations numériques décrivant le comportement des solutions sont présentées et un résultat d'existence globale des solutions en temps est démontré. En revanche, il paraît compliqué de trouver un comportement asymptotique général au vu des simulations produites, même si des solutions périodiques en temps sont attendues.

3. Paramètres : $\lambda_i = \lambda = 10$, $L_i = 1$, $a_i = b_i = D_i = 1$.

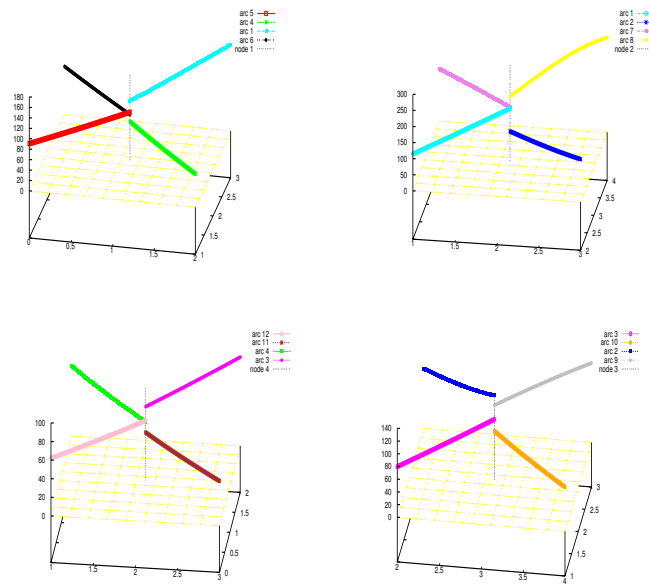


FIGURE 4.5 – Densités ρ asymptotiques représentées nœud par nœud pour le réseau de la figure 4.4.

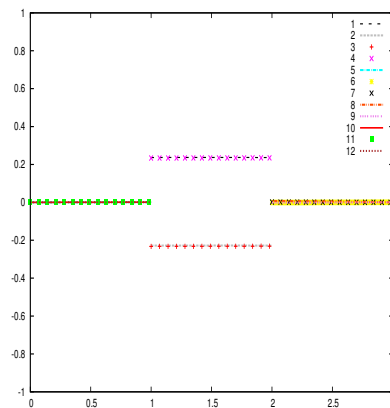


FIGURE 4.6 – Flux asymptotiques v des arcs du réseau de la figure 4.4.

4.2.1 Une hiérarchie de modèles

Modèles du premier ordre. Nous considérons deux populations en interaction : des proies et des chasseurs, décrits par leurs concentrations $\rho_p(t, x)$ et $\rho_c(t, x)$. On suppose que la présence de l'autre population influence la vitesse de la population en question selon la règle suivante : les chasseurs sont attirés par les proies, les proies sont repoussées par les chasseurs. Les deux densités peuvent être alors décrites par les équations :

$$\partial_t \rho_p + \nabla \cdot (\rho_p V_p) = 0, \quad \partial_t \rho_c + \nabla \cdot (\rho_c V_c) = 0, \quad (4.10)$$

où l'on suppose que les vitesses V_p (resp. V_c) dérivent des potentiels Φ_p (resp. Φ_c) :

$$V_p = \nabla \Phi_p, \quad V_c = \nabla \Phi_c. \quad (4.11)$$

En s'inspirant des modèles de chimiotactisme déjà discutés, on définit les potentiels par les équations de Poisson suivantes :

$$\Delta \Phi_p = \alpha \rho_c \text{ (avec } \alpha > 0), \quad -\Delta \Phi_c = \rho_p, \quad (4.12)$$

définition qui peut être vue comme la convolution d'une densité avec la solution élémentaire de $-\Delta$. En 1D, les équations (4.11) et (4.12) peuvent se généraliser en

$$\begin{aligned} V_p(t, x) &= \int_{y \neq x} \text{sgn}(x - y) \Gamma_p(x - y) \rho_c(t, y) dy, \\ V_c(t, x) &= - \int_{y \neq x} \text{sgn}(x - y) \Gamma_c(x - y) \rho_p(t, y) dy, \end{aligned} \quad (4.13)$$

où la fonction Γ n'est plus une simple constante ((4.11)–(4.12) correspond à $\Gamma_p = \alpha/2$, $\Gamma_c = 1/2$), mais dépend d'une vitesse maximale, d'un rayon de sécurité et d'un rayon de vigilance.

A partir de ce modèle, on peut décrire les positions $X_{p,1}, \dots, X_{p,N_p}$, $X_{c,1}, \dots, X_{c,N_c} \in \mathbb{R}$ de N_p proies et N_c chasseurs par le système d'équations différentielles :

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} X_{p,i} = \sum_{j=1}^{N_c} \text{sgn}(X_{p,i} - X_{c,j}) \Gamma_p(X_{p,i} - X_{c,j}), \\ \frac{d}{dt} X_{c,i} = \sum_{j=1}^{N_p} \text{sgn}(X_{p,j} - X_{c,i}) \Gamma_c(X_{p,j} - X_{c,i}), \end{cases} \quad (4.14)$$

en posant $\text{sgn}(0) = 0$. On a alors que $\rho_p(t, x) = \sum_{i=1}^{N_p} \delta(x - X_{p,i}(t))$ et $\rho_c(t, x) = \sum_{i=1}^{N_c} \delta(x - X_{c,i}(t))$ sont solutions de l'EDP (4.10) avec des vitesses définies par (4.13).

A l'aide de la forme de la solution élémentaire du laplacien, ce dernier système se généralise facilement en dimension supérieure.

Modèles du second ordre. On décrit maintenant la dynamique des proies et des chasseurs par l'évolution des paires positions/vitesses, chacune dans $\mathbb{R}^N \times \mathbb{R}^N$, notées $(X_{p,j}, \Xi_{p,j})$ et $(X_{c,k}, \Xi_{c,k})$. Le mouvement est décrit par ces équations :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} X_{p,j} &= \Xi_{p,j}, & \frac{d}{dt} X_{c,k} &= \Xi_{c,k}, \\ \frac{d}{dt} \Xi_{p,j} &= -\frac{1}{\tau} (\Xi_{p,j} - \nabla \Phi_p(t, X_{p,j})), & \frac{d}{dt} \Xi_{c,k} &= -\frac{1}{\tau} (\Xi_{c,k} - \nabla \Phi_c(t, X_{c,k})), \end{aligned}$$

où τ est un temps de relaxation et les potentiels sont définis grâce à un noyau de convolution.

A partir de ces modèles, on peut ajouter des fluctuations en vitesse. Un raisonnement similaire à celui des modèles du 1^{er} ordre nous amène à considérer des équations de type Vlasov. En intégrant dans l'espace des vitesses, on est alors ramené à un modèle de type hyperbolique, mais qui doit être fermé en trouvant des équations sur J_p et J_c :

$$\partial_t \rho_p + \nabla \cdot J_p = 0, \quad \partial_t \rho_c + \nabla \cdot J_c = 0. \quad (4.15)$$

A partir de là, diverses hypothèses peuvent être faites. En fermant à l'aide d'une minimisation de l'entropie, on obtient le modèle suivant de type Euler isotherme :

$$\begin{aligned} \partial_t J_p + \beta^2 \nabla \cdot \left(\frac{J_p \otimes J_p}{\rho_p} \right) + \beta^2 \nabla (\bar{\theta} \rho_p) - \gamma \rho_p \nabla \Phi_p &= -\frac{1}{\varepsilon} J_p, \\ \partial_t J_c + \beta^2 \nabla \cdot \left(\frac{J_c \otimes J_c}{\rho_c} \right) + \beta^2 \nabla (\bar{\theta} \rho_c) - \gamma \rho_c \nabla \Phi_c &= -\frac{1}{\varepsilon} J_c, \end{aligned}$$

couplé à (4.15) et où les potentiels sont donnés par

$$\Phi_p(t, x) = \int \mathcal{G}_p(x - y) \rho_p(t, y) dy, \quad \Phi_c(t, x) = - \int \mathcal{G}_c(x - y) \rho_c(t, y) dy.$$

En revanche, une fermeture de type régime champ faible donne les équations suivantes :

$$J_p = -\bar{\theta} \nabla \rho_p + \rho_p \nabla \Phi_p, \quad J_c = -\bar{\theta} \nabla \rho_c + \rho_c \nabla \Phi_c,$$

qui, combinées avec l'équation (4.15), donnent le modèle suivant :

$$\partial_t \rho_p + \nabla \cdot (\rho_p \nabla \Phi_p - \bar{\theta} \nabla \rho_p) = 0, \quad \partial_t \rho_c + \nabla \cdot (\rho_c \nabla \Phi_c - \bar{\theta} \nabla \rho_c) = 0.$$

et l'on retrouve deux modèles de Keller-Segel couplés.

4.2.2 Simulations numériques

Nous présentons ici quelques simulations numériques obtenues à partir des modèles d'EDOs et d'EDPs précédents. Les techniques numériques employées sont classiques.

Nous commençons par mettre en évidence un mouvement assez caractéristique dans le cas du modèle d'EDOs (4.14) à la figure 4.7. On considère un ensemble de plusieurs proies (resp. de plusieurs chasseurs) réparties aléatoirement autour d'une position donnée. Au point de rencontre des deux populations, les proies se séparent en deux parties, un bloc échappant aux chasseurs, l'autre bloc étant poursuivi par l'ensemble des chasseurs, qui adoptent une vitesse réduite.

Nous imposons ici des conditions périodiques en espace et nous observons des comportements périodiques en temps, aussi bien pour le modèle d'EDOs⁴ (4.14) en 1D avec un noyau modifié pour la définition du potentiel, en haut de la figure 4.8, que pour le modèle d'EDPs (4.10)-(4.11)-(4.12) en 1D, en bas de la figure 4.8. Dans les deux cas, les figures représentent l'évolution des trajectoires en fonction du temps. On remarque que les trajectoires issues de deux points très proches peuvent se séparer brutalement, aussi bien pour les EDOs que pour les EDPs. Enfin, l'allure des trajectoires des proies est plus ou moins reproduite par celles des chasseurs, même si il est difficile de décrire un comportement général, indépendant des paramètres et des conditions initiales. Il est à noter que les simulations des EDOs et des EDPs sont très dépendantes des pas de temps et d'espace utilisés et les motifs observés sont ainsi peu stables.

4. Paramètres : 10 proies, 5 chasseurs, temps final 0.5, pas de temps $\Delta t = 0.0001$.

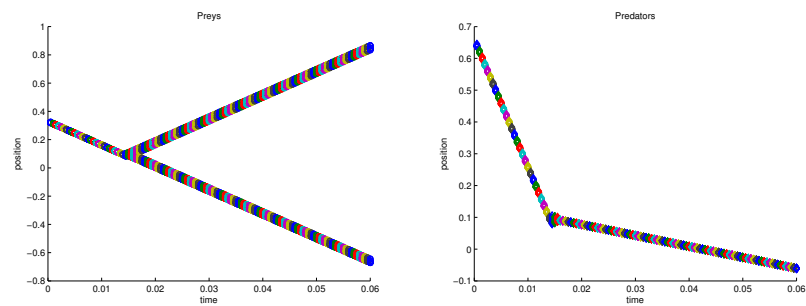


FIGURE 4.7 – Un ensemble de proies (à gauche) poursuivies par les chasseurs (à droite) avec $V_p < V_c$.

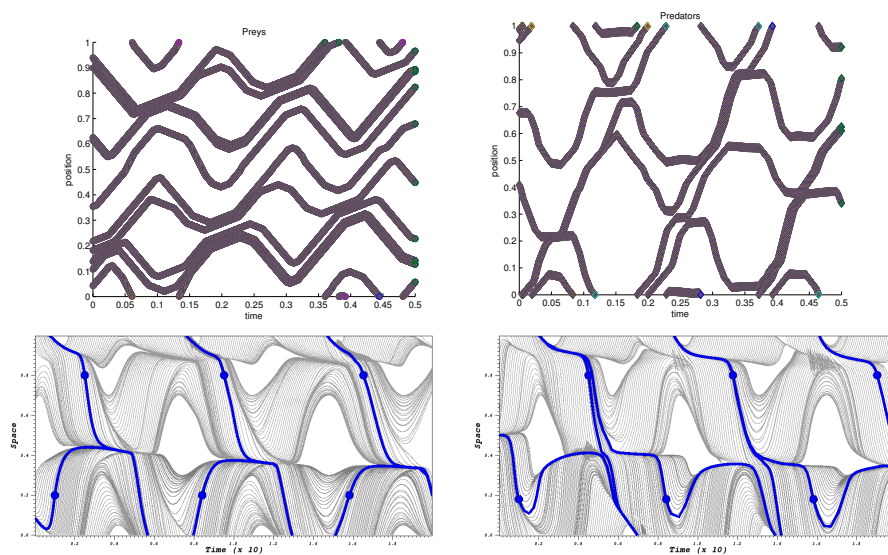


FIGURE 4.8 – Cas 1D : Modèles d'EDOs (en haut) et d'EDPs (en bas) et conditions aux bords périodiques. Trajectoires des proies (à gauche) et des chasseurs (à droite).

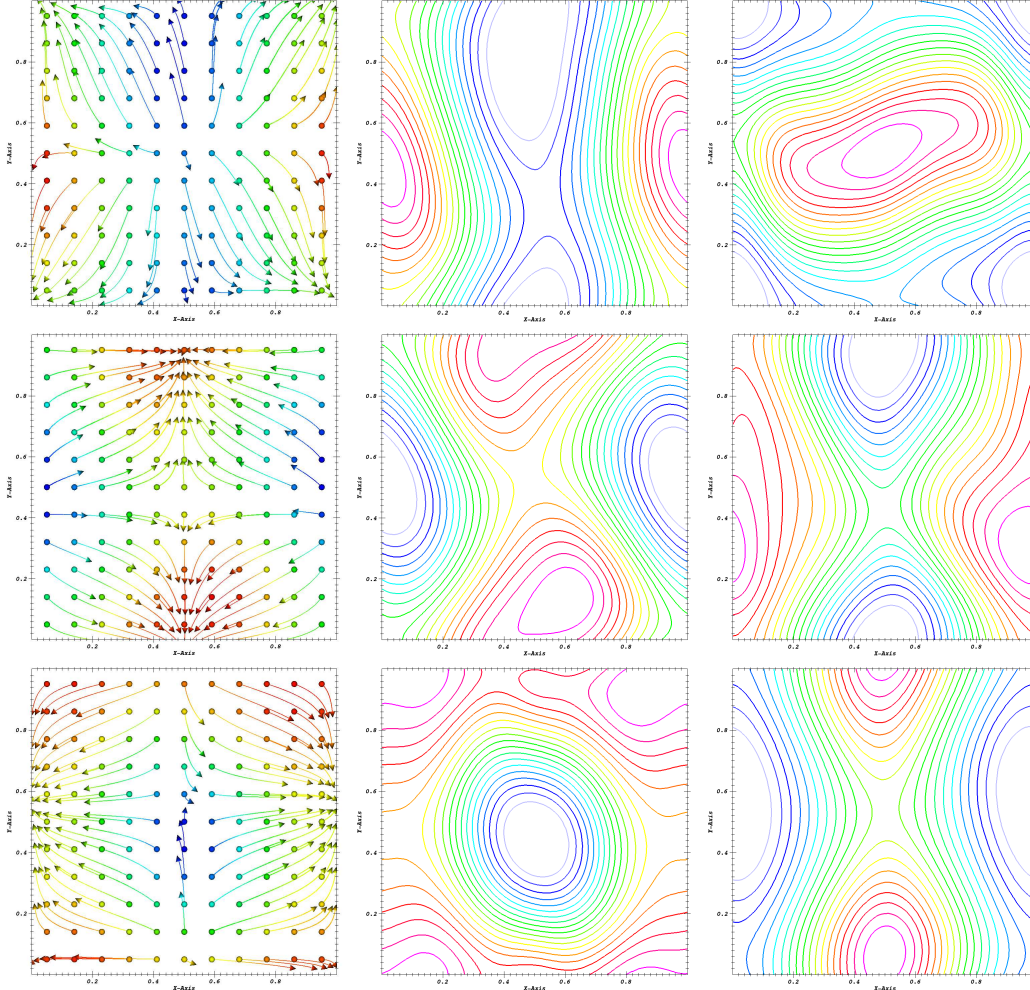


FIGURE 4.9 – Simulations 2D avec des conditions aux bords périodiques. Lignes de courant des proies (à gauche), concentration des proies (au centre), concentration des chasseurs (à droite) à $t = 47$ (en haut), $t = 55$ (au milieu) et $t = 63$ (en bas).

Enfin, nous obtenons à la figure 4.9 des résultats en 2D avec le modèle d'EDPs (4.10)-(4.11)-(4.12) où l'on observe clairement le mécanisme d'attraction/répulsion. Plus précisément, la dynamique du système se décompose en quatre phases : les proies se déplacent vers le point $(0.5, 0.5)$, puis vers le point $(1, 0.5)$ (figure du haut), vers le point $(0.5, 1)$ (figure du milieu) et vers le point $(1, 1)$ (figure du bas) avant de retourner au point $(0.5, 0.5)$. On rappelle que les 4 coins du domaine peuvent se ramener au point $(1, 1)$ par périodicité. Les chasseurs suivent un motif similaire, avec un certain retard cependant. Ici aussi, nous devons utiliser des pas de temps et d'espace suffisamment petits pour observer les motifs.

4.2.3 Un résultat d'existence globale

Nous avons obtenu des systèmes très proches du modèle de Keller-Segel. Il est intéressant de noter que la dynamique de ces systèmes à deux espèces est très différente et que l'on n'observe pas d'explosion de solutions dans ce cas. On peut prouver, en particulier, l'existence globale et l'unicité de solutions faibles pour le système (4.10)-(4.12), ainsi que la propagation de la régularité [Rs3] :

Théorème 4.3 *Soit $\rho_{p,\text{Init}}, \rho_{c,\text{Init}}$ des fonctions positives de $L^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}^N)$. Soit $0 < T < \infty$. Alors, il existe une unique solution faible $(\rho_p, \rho_c) \in L^\infty(0, T; L^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}^N))$ de (4.10)-(4.12)*

avec comme données initiales $\rho_{p,\text{Init}}, \rho_{c,\text{Init}}$. Cette solution est définie dans $\mathcal{C}^0([0, T]; L^q(\mathbb{R}^N))$ pour tout $1 \leq q < \infty$. Si, de plus, $\nabla \rho_{p,\text{Init}}, \nabla \rho_{c,\text{Init}}$ appartiennent à $L^\infty(\mathbb{R}^N)$, alors la solution appartient à $L^\infty(0, T; W^{1,\infty}(\mathbb{R}^N))$.

La preuve de ce théorème est basée sur des estimations a priori, mais la difficulté se situe dans le manque de régularité des potentiels, définis par la convolution avec le noyau singulier de l'équation de Poisson. Cependant, ici, le couplage empêche la formation de singularités en temps fini, contrairement à l'équation de Keller-Segel et la solution reste bornée, au moins localement en temps. On peut alors construire des solutions faibles, uniques, dans $L^1 \cap L^\infty$ sur tout intervalle $[0, T]$, $0 < T < \infty$. Le point clé est l'estimation a priori suivante :

Proposition 4.4 *On suppose que les données initiales vérifient*

$$\rho_{p,\text{Init}} \geq 0, \quad \rho_{c,\text{Init}} \geq 0, \quad \rho_{p,\text{Init}}, \rho_{c,\text{Init}} \in L^1 \cap L^\infty(\mathbb{R}^N).$$

Alors les solutions régulières de (4.10)-(4.12) vérifient

$$0 \leq \rho_p(t, x) \leq \|\rho_{p,\text{Init}}\|_{L^\infty}, \quad 0 \leq \rho_c(t, x) \leq \|\rho_{c,\text{Init}}\|_{L^\infty} e^{t\|\rho_{p,\text{Init}}\|_{L^\infty}}.$$

La proposition se montre en utilisant les courbes caractéristiques, après avoir montré la régularité des gradients des potentiels.

Ce résultat peut s'étendre sans trop d'efforts à des noyaux plus généraux.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté deux applications des modèles de chimiotactisme étudiés aux chapitres 2 et 3 et des modèles reliés.

La première application vient de la modélisation du déplacement de fibroblastes sur un réseau de fibres artificielles. Pour cela, nous avons étudié le modèle hyperbolique (1.4) posé sur les arcs d'un graphe avec des conditions de jonction aux nœuds. Des simulations numériques ont ainsi été obtenues, mais les limites du modèle déjà vues au chapitre 2 ne nous permettent pas d'obtenir des solutions quelle que soit la masse de départ.

La seconde application vient de la modélisation du phénomène de poursuite-évasion. Pour décrire l'interaction entre deux populations aux buts distincts, par exemples des proies et des chasseurs, nous proposons une hiérarchie de modèles d'équations différentielles ou d'EDPs, comprenant un noyau de type attractif et un de type répulsif. Dans le cas du modèle d'EDPs, nous avons montré qu'il y a existence globale en temps de solutions et nous avons présenté des simulations montrant des comportements périodiques en temps.

Chapitre 5

Travaux en cours et perspectives

Voici quelques perspectives en lien avec les travaux déjà mentionnés dans cette partie.

Schémas numériques pour des modèles de chimiotactisme

Un premier point est donc l'étude numérique de certains modèles de chimiotactisme en dimension 1 : nous avons vu que le schéma *Asymptotic High Order* proposé pour le modèle de Greenberg-Alt (1.4) dans [Ra5] est une bonne alternative aux schémas *well-balanced* mieux connus. C'est en effet une approche qui permet de trouver naturellement des schémas d'ordres plus élevés, sans avoir besoin de connaître la forme exacte des solutions stationnaires. Nous espérons pouvoir étendre les travaux effectués à des situations plus compliquées et proposer, entre autres, un schéma de ce type pour le cas quasi-linéaire du système de Gamba-Preziosi (1.5), c'est-à-dire passer d'un cadre linéaire avec source à un cadre non-linéaire avec source. Une autre extension envisagée est le cas d'un modèle hyperbolique dérivé d'un modèle cinétique, que l'on pense être plus réaliste pour modéliser le phénomène de "run and tumble". Des simulations de ce modèle en géométrie radiale sont prévues à l'aide d'un schéma de ce type dans un travail en collaboration avec Vincent Calvez, Nikolaos Bournaveas et Cristiana Di Russo. Enfin, une application à un modèle cinétique peut être également envisagée, pour améliorer par exemple le schéma proposé dans [36].

Une autre direction de recherche est l'extension au cas multi-dimensionnel du schéma proposé dans [Ra1, Ra2] ; de premières discussions ont été engagées avec Christophe Berthon, Anaïs Crestetto et Françoise Foucher. Il s'agit de calculer les solutions avec vide du modèle de Gamba-Preziosi (1.5) dans le cadre plus réaliste de la dimension 2 ou 3, en s'inspirant par exemple des travaux de Christophe Berthon et Françoise Foucher sur l'équation de shallow-water en 2D [15]. L'équation de shallow-water est une version simplifiée du modèle (1.5) puisqu'elle contient la même partie flux avec un terme source plus simple. Ainsi, les solutions stationnaires du système de shallow-water sont plus simples que celles du modèle de Gamba-Preziosi (1.5) et sont connues explicitement. Il est à noter que dans le cas de dimensions supérieures à 1, la classification complète des états stationnaires détaillée à la section 3.1 est inabordable et l'outil numérique se révèle indispensable pour étudier le comportement asymptotique du modèle (1.5).

Solutions stationnaires avec vide du modèle (1.5)

Au vu de la démarche que nous avons adoptée jusqu'ici et qui consiste à coupler une analyse numérique à des renseignements théoriques, nous espérons pouvoir progresser dans l'étude des solutions stationnaires. Concernant les solutions stationnaires avec vide du modèle de Gamba-Preziosi, une question qui reste en suspens et qui est importante pour la modélisation est de déterminer quelle pression non linéaire (par exemple quelle loi de puissance) permet de

reproduire les comportements observés. Pour y répondre, l'extension de la classification des états stationnaires expliquée à la section 3.1 au cas $\gamma \neq 2$ ou au cas radial 2D pour $\gamma = 2$ seraient des avancées attendues. Cependant, cette extension est rendue difficile par le fait que la forme explicite des solutions stationnaires que nous avons déterminée pour $\gamma = 2$ n'est plus valide dans les autres cas. Nous prévoyons donc d'étudier ce point là à l'aide de simulations numériques des équations différentielles sous-jacentes.

Modèles de poursuite-évasion

La première phase du projet de modélisation de la poursuite-évasion a été l'écriture d'une hiérarchie de modèles, comme présenté à la section 4.2. Nous espérons trouver comme solutions de ce modèle des solutions périodiques en temps ; une étude qualitative et numérique des solutions est prévue, en collaboration avec Thierry Goudon, Boniface Nkonga et Michel Rascle et notamment des simulations numériques des modèles hyperboliques développés.

Etude de modèles pour le chimiotactisme sur réseau

Après la soumission d'un premier article sur ce sujet [Ra3], l'étude des modèles hyperboliques de chimiotactisme sur réseau est encore très incomplète. En particulier, nous avons mis en évidence les limites du modèle de Greenberg-Alt (1.4) qui, sous certaines conditions, ne conserve pas la positivité des densités. Ceci nous amène à envisager de travailler avec le système de Gamba-Preziosi (1.5) qui, lui, devrait conserver la positivité des densités. Dans ce cas, les conditions de transmission doivent être modifiées et un schéma numérique adapté notamment aux conditions de transmission devrait être proposé et testé.

Cependant, le passage du modèle semi-linéaire au modèle quasi-linéaire, comprenant des termes inertiels et une pression définie par une loi de puissance, n'est pas évident. Un premier pas dans cette direction serait déjà de proposer un schéma numérique pour l'équation de shallow-water sur réseau, en s'inspirant du modèle et des résultats d'existence proposés dans [120, 90]. Il est à noter que le modèle de shallow-water posé sur un réseau est utilisé dans la modélisation des canaux d'irrigation. Ce travail fait l'objet d'une collaboration en cours avec Gabriella Puppo et Maya Briani.

Schéma asymptotic preserving pour le trafic routier

Enfin, une activité annexe des précédentes a été le développement et la mise en oeuvre d'un schéma numérique *asymptotic preserving* pour le modèle d'Aw-Rascle rescalé pour le trafic routier. Le modèle d'Aw-Rascle est un système hyperbolique bien connu du domaine de la modélisation du trafic routier ; il s'agit d'un système couplant une équation pour la densité de voitures et une équation pour la vitesse et faisant intervenir une réserve de vitesse, qui peut s'apparenter à une pression. En collaboration avec Florent Berthelin, Thierry Goudon et Bastien Polizzi, nous proposons un schéma *asymptotic preserving* du système précédent, basé sur le schéma de Glimm, avec une condition de stabilité indépendante du petit paramètre, et qui préserve une contrainte sur la densité de voitures. Un projet est d'étendre ce schéma pour le modèle multi-voies.

Deuxième partie

Modèle pour la formation de biofilms

Chapitre 6

Modélisation des biofilms

6.1 Qu'est-ce qu'un biofilm ?

Un biofilm est une agrégation complexe, ressemblant à un gel, de microorganismes, comme des bactéries, des cyanobactéries, des algues, des protozoaires ou des champignons. Ces microorganismes s'agglutinent ensemble, adhèrent à une surface et s'engluent dans une matrice extra-cellulaire polymérique, appelée EPS, qu'ils produisent. Un biofilm est un mélange de solide et de liquide et se développe principalement sur des surfaces qui sont en contact permanent avec de l'eau. De plus, des nutriments présents dans l'environnement liquide sont amenés à chaque individu du biofilm par advection - diffusion dans le liquide et diffusion dans le biofilm lui-même.

Le terme " biofilm " a été proposé en 1978 par Costerton [53] pour décrire ce qui est considéré, à présent, comme le mode de vie normal des bactéries dans les environnements naturels, industriels ou hospitaliers. Quelques biofilms sont bénéfiques, par exemple certaines bactéries en biofilms peuvent agir pour enlever des contaminants du sol, former une barrière de protection contre la pollution dans les aquifères ou favoriser l'extraction du pétrole [45, 69]. Cependant, d'autres biofilms sont nuisibles et provoquent de sérieux problèmes sanitaires et économiques. Ils sont la cause de nombreux problèmes dans des infrastructures, par exemple les conduites industrielles, les centrales, les systèmes d'air conditionné ou les réseaux de distribution d'eau. Les hôpitaux et le corps humain sont aussi susceptibles d'être colonisés par des bactéries en biofilms [87] : des biofilms ont été observés dans les lentilles de contact, les implants, les simulateurs cardiaques, les cathéters et on retrouve une structure de biofilm avec les bactéries responsables de la plaque dentaire et, plus grave, de la mucoviscidose ou des infections nosocomiales.

Les biofilms peuvent développer une résistance aux traitements, notamment antibiotiques ou aux défenses immunitaires humaines et sont, de ce fait, très difficiles à éradiquer ; non seulement l'EPS forme une barrière physique pour les petites molécules, mais certaines bactéries deviennent résistantes (" persistent ") aux anti-biotiques. Ils peuvent également se former dans des conditions extrêmes, comme des températures très élevées. Toutes ces propriétés sont dues à une diversité microbienne importante au sein du biofilm, avec plusieurs phénotypes de la même espèce en coopération et un mode de communication avancé. On a ainsi observé l'utilisation de quorum sensing chez certaines bactéries, qui permet l'expression coordonnée de certains gènes au sein d'une même population bactérienne. Il est donc crucial de comprendre les mécanismes de la formation et de la croissance des biofilms, afin de proposer des traitements adaptés à leur développement.

Ce développement se déroule en plusieurs temps : d'abord, des bactéries en forme planctonique s'approchent d'une surface et s'y attachent. Ensuite, durant une phase de colonisation,

elles perdent leur flagelle et produisent de l'EPS. Pendant la phase de croissance, les bactéries construisent une structure 3D, influencées par les conditions environnementales, comme la lumière, la température ou la quantité de nutriments disponible. Enfin, une ou plusieurs parties du biofilm se détachent pour coloniser d'autres endroits de la surface, voir figure 6.1. Les mécanismes connus de formation de biofilms sont exposés dans [87] et dans [116] pour *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Bacillus subtilis*, *Staphylococcus aureus*.

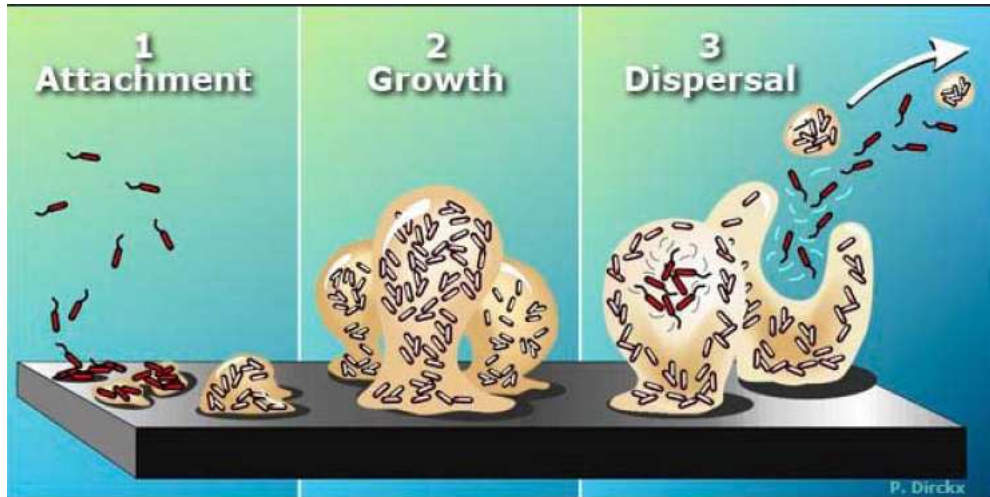


FIGURE 6.1 – Phases de développement d'un biofilm.

6.2 Différents modèles mathématiques

L'étude des biofilms étant un sujet en plein essor, plusieurs types de modèles ont été proposés pour décrire une des étapes de la formation de biofilms : certains se focalisent par exemple sur la toute première phase de développement sans la formation d'EPS, alors que d'autres se concentrent sur l'importance de l'EPS dans la formation de structures de type champignons [50]. On trouve également une série d'articles qui s'intéressent au quorum sensing, mode de "communication" privilégié des bactéries dans un biofilm et aux traitements antibiotiques et anti-quorum sensing et à leurs effets [4, 163] pour *Pseudomonas Aeruginosa*. Enfin, d'autres s'attachent à modéliser l'effet des désinfections sur les bactéries résistantes [51]

Si ces modèles se distinguent les uns des autres par les phénomènes étudiés ou par les espèces en jeu, on peut aussi les classer selon le type de modèle considéré [122, 109]. Les tout premiers modèles introduits s'attachent à quantifier la croissance en 1D d'un biofilm et proposent un modèle à 1 espèce et 1 substrat, sans s'intéresser à la structure spatiale du biofilm, puis ils ont été généralisés à des modèles multi-dimensionnels, multi-espèces et multi-substrats. Il s'agit alors principalement de modèles avec des équations de réaction-diffusion construites en appliquant les lois d'action de masse, parfois avec des frontières libres [162, 122].

Ensuite, à l'aide des progrès de la microscopie, on s'est aperçu des structures très particulières qui pouvaient se développer au sein d'un biofilm [63] et on a commencé à étudier les comportements de type mécanique des biofilms. On s'est intéressé alors à des modèles de type multi-dimensionnel basés sur des automates cellulaires [114, 122], qui représentent de façon discrète les bactéries au sein du biofilm. Ces modèles qui suivent les bactéries une à une, permettent d'ajouter de nombreuses règles microscopiques, mais ils sont très coûteux pour simuler de grandes colonies et assez aléatoires du point de vue des solutions obtenues. Une autre possibilité est constituée des modèles entièrement continus [109], en considérant les propriétés

visco-élastiques du biofilm qui se déforme sous l'effet de la pression. Ces propriétés ont été mises en évidence par des expériences de physique [164] qui prouvent que le biofilm est un fluide complexe et ont amené à considérer une approche hydrodynamique de la modélisation des biofilms [115].

Parmi ces modèles, un certain nombre d'entre eux introduisent une interface entre la région formée de biomasse et la région liquide [1, 163, 50, 51, 63, 45], interface pour laquelle il faut trouver une loi physique pour pouvoir la décrire, ce qui n'est pas toujours facile. Pour éviter cela, on peut considérer plusieurs phases différentes cohabitant. Par exemple, dans [4], on considère un modèle 1D composé de 4 phases : cellules, cellules mortes, EPS et liquide avec une vitesse pour la phase solide et une pour la phase liquide. Cependant, la fermeture du système ne permet pas de généraliser cette étude à une dimension supérieure.

Finalement, afin d'avoir des modèles avec des vitesses finies de propagation des fronts, on considère aussi des modèles multi-phasiques de type mélange [165, 166, Ra4, Rs2] comprenant également des équations pour les vitesses. Dans ces modèles, l'évolution des fractions massiques est donnée par les équations de conservation de la masse, comme précédemment, et l'évolution des vitesses est calculée via le moment par les équations de bilan des forces. Nous écrivons alors une équation pour chaque vitesse et, contrairement aux autres approches, nous ne négligeons pas les termes inertiels, c'est-à-dire la dérivée en temps du moment et les termes non linéaires, ceci afin de garder la structure hyperbolique du système.

Une fois ces modèles proposés, une étude numérique est effectuée, parfois en comparaison avec des expériences. Les méthodes employées dépendent alors du type de modèle considéré ; par exemple, dans [1], des méthodes level-set sont utilisées pour résoudre les problèmes de frontière libre. En revanche, l'étude analytique des modèles n'est pas aisée et elle se fait généralement sur des modèles simplifiés. Il s'agit alors de calculer des états stationnaires et leur stabilité [51, 165], de calculer des travelling waves et leur stabilité pour des modèles de type advection 1D traitant du quorum sensing [4, 163] ou d'étudier des solutions périodiques en réponse, par exemple, à un traitement périodique [51]. Les résultats de type existence de solutions et caractère bien posé du problème concernent essentiellement des modèles composés d'équations de réaction-diffusion [70] ou des modèles avec frontière libre en 1D [63] ou en dimensions supérieures [129, 80].

Enfin, nous concluons en citant l'article [49] qui explore les liens entre modèles mathématiques et expériences biologiques pour la formation des biofilms et qui clarifie la difficulté de modéliser un système aussi complexe qu'un biofilm peut l'être.

Chapitre 7

Modèle hydrodynamique pour la croissance de biofilms

Sommaire

Contexte biologique	80
7.1 Modèle hydrodynamique de formation de biofilms de cyanobactéries	82
7.1.1 Equations de conservation de la masse et termes sources	82
7.1.2 Equations de conservation des moments	83
7.1.3 Dépendance en la lumière	84
7.2 Stabilité des états stationnaires en 1D	84
7.2.1 Simplification du système en 1D	84
7.2.2 Etats stationnaires constants	85
7.2.3 Stabilité linéaire des états stationnaires	85
7.3 Difficultés numériques	85
7.3.1 Problème de l'annulation de phase	87
7.3.2 Traitement du terme de pression	87
7.4 Choix des paramètres	87
7.4.1 Estimation des paramètres	87
7.4.2 Sensitivité des paramètres	88
7.5 Simulations numériques	88
7.5.1 Cas 1D	88
7.5.2 Cas 2D et 3D	90
Conclusion	91

Nous nous intéressons dans ce chapitre à la modélisation de la croissance de biofilms sur des surfaces de monuments. Ce projet est né au tout début de discussions avec des chercheurs de l'Istituto per la Conservazione e la Valorizzazione dei Beni Culturali (ICVBC), institut du CNR italien basé à Florence qui regroupe des spécialistes de la conservation des monuments, des chimistes, des géologues, etc... Ces chercheurs, parmi lesquels P. Tiano et O. Cuzman, désiraient modéliser la croissance d'un biofilm au fond de fontaines, afin de comparer l'évolution au fond de différentes fontaines, à Florence ou en Espagne. Ils souhaitaient, entre autres, comprendre l'influence des conditions de lumière et de température sur le développement du biofilm, tout en ayant une bonne connaissance de la répartition spatiale. Cependant, cet institut ne possède pas de biologistes en son sein et nous avons dû contacter d'autres chercheurs afin d'obtenir les renseignements biologiques nécessaires pour l'écriture d'un modèle réaliste. Nous avons ainsi collaboré sur le comportement biologique de certaines cyanobactéries avec P. Albertano, R. Congestri et F. Di Pippo [52, 60] du laboratoire de biologie des algues de l'Université Tor Vergata de Rome. Après une phase de latence, nous nous proposons à présent de tester le modèle présenté dans ce chapitre avec des expériences effectuées par R. Congestri et F. Di Pippo à mettre en place avec elles.

Nous proposons ici un modèle de biofilms issu de la théorie des mélanges et comprenant 4 phases distinctes. Nous couplons les équations de conservation de la masse pour ces phases, ce qui est la base de la plupart des modèles employés, à des équations de conservation du moment sans simplifier les termes non linéaires, ce qui est nettement plus rare dans la littérature sur le sujet. Nous incluons aussi une dépendance en la lumière, qui correspond aux cyanobactéries que nous étudions. La stabilité des états stationnaires est analysée. Nous présentons également un schéma numérique qui traite le problème de l'annulation des phases et du calcul de la pression hydrostatique. Avant de présenter les simulations numériques correspondantes, nous estimons les paramètres qui nous sont utiles et nous étudions leur sensibilité.

Ce chapitre correspond aux articles [Ra4], [Rs2] et [Rp2].

Contexte biologique

Nous avons rappelé au chapitre 1 ce que sont les biofilms et comment ils se forment. Nous nous intéressons ici plus particulièrement à la croissance de biofilms sur des surface de monuments anciens, tels les fonds des fontaines.

La microbiote des pierres représente un écosystème complexe qui se développe de différentes manières, en fonction des conditions environnementales et des propriétés physicochimiques du matériau, qui est lui-même affecté par les effets combinés de facteurs physique, chimique et biologique. Des expériences montrent le rôle essentiel des agents biologiques dans la détérioration de la pierre. En premier lieu, la colonisation des surfaces extérieures des bâtiments, des monuments et des sites archéologiques par des microorganismes crée des patines non esthétiques à la surface de la pierre. De plus, l'EPS produite peut engendrer des contraintes mécaniques de la structure minérale, qui altèrent la constitution de la pierre [54], par exemple la distribution et la taille des pores. Ceci modifie alors, entre autres, la perméabilité des minéraux, la circulation de l'humidité à l'intérieur de la pierre ou le comportement de la pierre vis à vis de la température. Enfin, la présence de biofilms sur des surfaces lapidaires accélère l'accumulation de polluants atmosphériques, qui eux-mêmes auront un effet d'érosion de la structure minérale.

Le type d'organismes présents sur les monuments en pierre est très varié : on y trouve des algues, des cyanobactéries, des mousses (classe des photolithoautotrophes), des champignons (classe des chimioorganohétérotrophes) ou encore des bactéries chimiolithoautotrophes, qui produisent des acides, comme les acides nitriques ou sulfuriques qui changent le pH environnant. Les microorganismes photoautotrophes peuvent aussi bien croître sur la surface (phototrophes

epilithiques) ou peuvent pénétrer de quelques millimètres dans le système de pores de la pierre (phototrophes endolithiques).

De nombreuses études ont montré l'importance des phototrophes dans la détérioration physique et chimique des pierres [54]. Nous nous concentrons ici sur une classe particulière de photoautotrophes : les cyanobactéries, très présentes au fond des fontaines. Les cyanobactéries, aussi appelées algues bleu-vert ou bactéries bleu-vert ou Cyanophyta, forment un phylum de bactéries qui obtiennent leur énergie par photosynthèse, grâce à un système élaboré et fortement organisé de membranes internes, et qui tirent leur nom de leur couleur. Ces colonies peuvent former des filaments ou des feuillets et chacun des individus de la colonie a typiquement un mur cellulaire fin et gélatineux. Elles sont adaptées pour résister à des conditions difficiles en raison de leur enveloppe extérieure et de la présence de pigments protecteurs. Comme elles sont phototrophes et n'ont besoin pour croître que de lumière, d'eau et d'ions minéraux, ces microorganismes colonisent aisément les surfaces externes des monuments anciens et développent un biofilm, qui, à son tour, altère l'apparence du monument et sert de substrat pour la croissance d'autres détériorateurs, qui amplifient la détérioration chimique et physique.

Ici, nous nous concentrons sur la micro-algue présente majoritairement, une cyanobactérie de l'ordre des *Chroococcales*, appelée *Gloeocapsa*, cf figure 7.1, qui est impliquée dans les dégradations de la pierre. Il s'agit d'une bactérie photoautotrophe procaryote, qui sécrète une gaine d'EPS gélatineuse individuelle qui l'enrobe [52, 60]. Nous proposons alors un modèle de formation de

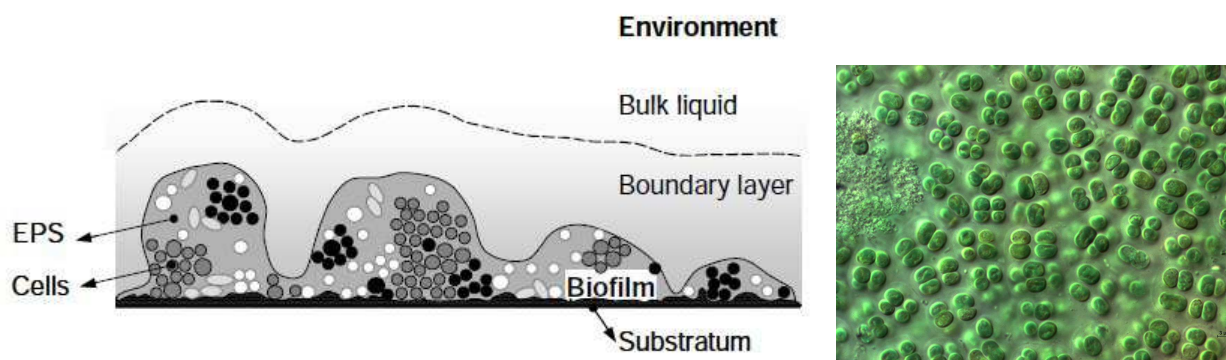


FIGURE 7.1 – A gauche, structure d'un biofilm. A droite, *Chroococcales Gloeocapsa*.

biofilms de *Chroococcales Gloeocapsa* au fond d'une fontaine. Comme les cyanobactéries sont capables de développer un biofilm sans le concours d'autres organismes, nous pouvons considérer une seule espèce en présence, à savoir les cyanobactéries et nous pouvons omettre, dans un premier temps, la complexité de la coopération de différents microorganismes les uns avec les autres. Ainsi, nous considérons un biofilm composé uniquement de cyanobactéries vivantes et mortes (ou inertes), d'EPS et d'eau. Nous cherchons maintenant quels sont les facteurs essentiels au développement de ce biofilm. Les nutriments sont supposés être de volume négligeable et en quantité suffisante pour ne pas influencer la croissance du biofilm et nous ne les incluons pas dans le modèle initial. En revanche, l'eau et la lumière sont deux facteurs indispensables au développement. Le taux de croissance des bactéries et le taux de production d'EPS dépendront ainsi directement de la quantité d'eau disponible localement. La dépendance en la température doit aussi être prise en compte de telle sorte que des conditions de température moins favorables affectent le taux de reproduction des bactéries. Finalement, on suppose aussi que les cyanobactéries sont totalement enrobées dans l'EPS qu'elles produisent et que la vitesse de déplacement des bactéries et de l'EPS est donc identique. Toutes ces données fournies par les biologistes avec qui nous collaborons ont été intégrées dans le modèle présenté dans ce chapitre.

7.1 Modèle hydrodynamique de formation de biofilms de cyanobactéries

On considère ici un modèle multi-phasique issu de la théorie des mélanges [139, 2] à 4 composantes, dont les inconnues principales sont les fractions volumiques de chaque phase, à savoir des cyanobactéries (notée B) de type *Chroococcales Gloeocapsa*, des bactéries mortes ou inertes (notée D), de la matrice extra-cellulaire polymérique (notée E) et du liquide (notée L). On suppose que les densités de masse des phases sont constantes, en supposant que chaque phase est incompressible, et par souci de simplification, qu'elles sont toutes égales entre elles. Dans la suite, ϕ désignera une phase quelconque (avec $\phi = B, D, E, L$).

Comme l'EPS englobe les cellules, on suppose que les cyanobactéries, les bactéries mortes et l'EPS ont la même vitesse de transport, appelée vitesse solide et notée \mathbf{v}_S , alors que le liquide a sa vitesse propre, notée \mathbf{v}_L .

7.1.1 Equations de conservation de la masse et termes sources

On note Γ_ϕ , avec $\phi = B, D, E, L$, les taux d'échange de masse entre les phases. Les équations de conservation de la masse s'écrivent :

$$\begin{cases} \partial_t B + \nabla \cdot (B\mathbf{v}_S) = \Gamma_B, \\ \partial_t D + \nabla \cdot (D\mathbf{v}_S) = \Gamma_D, \\ \partial_t E + \nabla \cdot (E\mathbf{v}_S) = \Gamma_E, \\ \partial_t L + \nabla \cdot (L\mathbf{v}_L) = \Gamma_L. \end{cases} \quad (7.1)$$

On suppose que l'on a la contrainte suivante, qui traduit la conservation du volume et le fait que le mélange est saturé :

$$B + D + E + L = 1. \quad (7.2)$$

Nous supposons de plus la conservation totale de la masse du mélange, à savoir :

$$\Gamma_B + \Gamma_D + \Gamma_E + \Gamma_L = 0, \quad (7.3)$$

qui indique que le mélange est fermé et qu'il n'y a pas de production de masse pour le mélange global.

En ajoutant les 4 équations de conservation de la masse (7.1) et en utilisant (7.2) et (7.3), on obtient la contrainte d'incompressibilité moyenne :

$$\nabla \cdot ((B + D + E)\mathbf{v}_S + L\mathbf{v}_L) = \nabla \cdot ((1 - L)\mathbf{v}_S + L\mathbf{v}_L) = 0. \quad (7.4)$$

Il nous faut maintenant ajouter les considérations biologiques au modèle et nous les prenons en compte dans les termes de production de masse suivants :

$$\begin{aligned} \Gamma_B &= k_B L B - k_D B, \\ \Gamma_D &= \alpha k_D B - k_N D, \\ \Gamma_E &= k_E L B - \varepsilon E. \end{aligned}$$

Le terme Γ_B est la différence entre un terme de naissance avec un taux $k_B L$, qui dépend donc de la quantité d'eau disponible dans un voisinage, et un terme de mort avec un taux k_D . Ce dernier terme se retrouve comme un terme de création dans le taux d'échange de masse des bactéries mortes Γ_D avec un coefficient α , le reste se retrouvant dans le liquide. Dans Γ_D , on retrouve aussi un taux de décroissance naturelle. La production d'EPS est représentée par un

terme avec un taux de croissance $k_E L$, alors que la décroissance se produit avec un taux ε . On remarque que le liquide est un facteur limitant, aussi bien pour la production de bactéries que d'EPS. Enfin, le taux d'échange de masse pour le liquide Γ_L est calculé à l'aide de (7.3), c'est-à-dire $\Gamma_L = B((1 - \alpha)k_D - k_B L - k_E L) + k_N D + \varepsilon E$.

7.1.2 Equations de conservation des moments

En s'inspirant de [2, 8], nous écrivons l'équation de conservation des moments pour la phase ϕ , après quelques manipulations, sous la forme :

$$\partial_t(\phi \mathbf{v}_\phi) + \nabla \cdot (\phi \mathbf{v}_\phi \otimes \mathbf{v}_\phi) = \mathbf{m}_\phi - \phi \nabla P + \nabla \cdot (\phi \mathbf{T}_\phi) + \Gamma_\phi \mathbf{v}_\phi, \quad (7.5)$$

où $\phi \mathbf{v}_\phi$ est le moment de la phase ϕ , $\phi \mathbf{v}_\phi \otimes \mathbf{v}_\phi$ est le terme inertiel, \mathbf{T}_ϕ le tenseur des contraintes qui reflète les forces internes à une même phase, \mathbf{m}_ϕ les forces d'interaction entre les phases et la force $\Gamma_\phi \mathbf{v}_\phi$ liée aux changements de phases. P est la pression hydrostatique et agit comme un multiplicateur de Lagrange, qui permet de satisfaire la contrainte de saturation (7.2).

La conservation totale du moment, en l'absence de forces extérieures, implique que

$$\sum_{\phi=B,D,E,L} (\mathbf{m}_\phi + \Gamma_\phi \mathbf{v}_\phi) = 0. \quad (7.6)$$

Pour la phase liquide, l'équation s'écrit :

$$\partial_t(L \mathbf{v}_L) + \nabla \cdot (L \mathbf{v}_L \otimes \mathbf{v}_L) = -L \nabla P + \nabla \cdot (L \mathbf{T}_L) + \mathbf{m}_L + \Gamma_L \mathbf{v}_L.$$

Pour l'ensemble des 3 phases solides, on additionne les équations (7.5) pour $\phi = B, D, E$ qui ont la même vitesse \mathbf{v}_S et on utilise les 3 équation (7.2), (7.3) et (7.6), ce qui donne

$$\partial_t((1 - L) \mathbf{v}_S) + \nabla \cdot ((1 - L) \mathbf{v}_S \otimes \mathbf{v}_S) = -(1 - L) \nabla P + \nabla \cdot \left(\sum_{\phi \neq L} \phi \mathbf{T}_\phi \right) - \mathbf{m}_L - \Gamma_L \mathbf{v}_L.$$

Les hypothèses pour déterminer les termes restants sont les suivantes : $\Sigma = \sum_{\phi \neq L} \phi \mathbf{T}_\phi = -\gamma(1 - L) \mathbf{I}$ avec $\gamma > 0$ et $\mathbf{T}_L = 0$, ce qui traduit que l'eau est au repos en l'absence de bactéries ou d'EPS. On suppose aussi que les forces d'interaction suivent la loi de Darcy, à savoir $\mathbf{m}_L = -M(\mathbf{v}_L - \mathbf{v}_S)$, où M est une constante.

Le système complet se réécrit alors sous la forme suivante :

$$\partial_t B + \nabla \cdot (B \mathbf{v}_S) = B(k_B L - k_D), \quad (7.7a)$$

$$\partial_t D + \nabla \cdot (D \mathbf{v}_S) = \alpha k_D B - k_N D, \quad (7.7b)$$

$$\partial_t E + \nabla \cdot (E \mathbf{v}_S) = k_E B L - \varepsilon E, \quad (7.7c)$$

$$L = 1 - (B + D + E), \quad (7.7d)$$

$$\partial_t((1 - L) \mathbf{v}_S) + \nabla \cdot ((1 - L) \mathbf{v}_S \otimes \mathbf{v}_S) + (1 - L) \nabla P = \nabla \Sigma + (M - \Gamma_L) \mathbf{v}_L - M \mathbf{v}_S, \quad (7.7e)$$

$$\partial_t(L \mathbf{v}_L) + \nabla \cdot (L \mathbf{v}_L \otimes \mathbf{v}_L) + L \nabla P = -(M - \Gamma_L) \mathbf{v}_L + M \mathbf{v}_S, \quad (7.7f)$$

$$\nabla \cdot ((1 - L) \mathbf{v}_S + L \mathbf{v}_L) = 0. \quad (7.7g)$$

Sur les bords, on impose les conditions de Neumann pour les fractions de volume et des conditions de type no-flux pour les vitesses :

$$\nabla B \cdot n|_{\partial\Omega} = \nabla E \cdot n|_{\partial\Omega} = \nabla D \cdot n|_{\partial\Omega} = 0, \quad \mathbf{v}_S \cdot n|_{\partial\Omega} = \mathbf{v}_L \cdot n|_{\partial\Omega} = 0.$$

7.1.3 Dépendance en la lumière

La lumière est une variable fondamentale pour les cyanobactéries photoautotrophes, permettant à ces organismes de photosynthétiser des composés inorganiques [132]. Ils sont aussi sensibles à la température et à la quantité de nutriments disponibles [113] et leurs taux de croissance peuvent être affectés en cas de conditions environnementales non optimales [155, 71, 160].

On suppose que les taux k_D , k_E et k_N sont indépendants de l'intensité lumineuse I [126], au contraire de k_B . Le taux k_B dépend de I comme suit : $k_B(x, y, z, t) = k_{B0} \cdot g(I(x, y, z, t))$, où k_{B0} est le taux optimal et $g(I) \in [0, 1]$ est un facteur d'efficacité. L'intensité lumineuse est absorbée par la matière qu'elle traverse [152] selon la profondeur, c'est-à-dire $I(x, y, z, t) = I_0(x, y, t)e^{-\int_z^H \mu(s)ds}$, avec $\mu = \mu_0(1 + \mu_h(B + E + D))$ comme coefficient d'absorption. Le facteur d'efficacité pour la croissance d'algues a la forme suivante [155, 71] :

$$g(I) = 2w(1 + \beta) \frac{\hat{I}}{\hat{I}^2 + 2\beta\hat{I} + 1}, \text{ avec } \hat{I}(x, y, z, t) = \frac{I}{I_{opt}} = \frac{I_0(t)}{I_{opt}} e^{-\int_z^H \mu(s,t)ds},$$

où I_{opt} est l'intensité lumineuse optimale, w est le taux de croissance maximal et β est un paramètre à choisir. La fonction g est maximale en I_{opt} et s'annule en 0 et en l'infini.

L'objet de cette étude est de mettre en évidence les conditions optimales de croissance de biofilms et en particulier de reproduire l'influence du manque de lumière au fond du biofilm : la lumière étant absorbée par la biomasse qu'elle traverse, les bactéries du fond reçoivent moins de lumière, ce qui implique une croissance plus grande en surface qu'en profondeur. Cette prise en compte de l'éclairage permet aussi d'étudier la croissance des biofilms sous des conditions de lumière artificielles, avec des éclairages à des fréquences plus ou moins rapides et de calibrer les conditions d'éclairage optimales pour une culture de biofilms.

7.2 Stabilité des états stationnaires en 1D

7.2.1 Simplification du système en 1D

Nous nous concentrons ici sur le cas 1D avec des coefficients constants, ce qui nous permet d'étudier la stabilité linéaire des états stationnaires. Dans ce cas particulier, on peut intégrer l'équation d'incompressibilité à l'aide des conditions aux bords pour exprimer \mathbf{v}_L en fonction de \mathbf{v}_S , lorsque $L \neq 0$:

$$L\mathbf{v}_L + (1 - L)\mathbf{v}_S = 0. \quad (7.8)$$

De plus, à l'aide de cette dernière équation et en additionnant (7.7e) et (7.7f), on obtient une expression simplifiée pour $\partial_x P$:

$$\partial_x P = -\gamma \partial_x(1 - L) - \partial_x((1 - L)\mathbf{v}_S^2 + L\mathbf{v}_L^2). \quad (7.9)$$

Ainsi, en développant les équations du système (7.7), en les combinant et en utilisant les équations (7.9) et (7.8) dans le cas où $L \neq 0, 1$, on obtient le système réduit 1D suivant :

$$\begin{cases} \partial_t B + \mathbf{v}_S \partial_x B + B \partial_x \mathbf{v}_S = k_B B L - k_D B, \\ \partial_t E + \mathbf{v}_S \partial_x E + E \partial_x \mathbf{v}_S = k_E B L - \varepsilon E, \\ \partial_t D + \mathbf{v}_S \partial_x D + D \partial_x \mathbf{v}_S = \alpha k_D B - k_N D, \\ L = 1 - (B + D + E), \\ \partial_t \mathbf{v}_S + \frac{3L - 2}{L} \mathbf{v}_S \partial_x \mathbf{v}_S + \left(\frac{L}{1 - L} \gamma - \frac{\mathbf{v}_S^2}{L^2} \right) \partial_x (B + E + D) = \frac{\Gamma_L - M}{L(1 - L)} \mathbf{v}_S, \\ \mathbf{v}_L = \frac{L - 1}{L} \mathbf{v}_S, \end{cases} \quad (7.10)$$

avec les conditions aux bords

$$\partial_x B = \partial_x E = \partial_x D = \mathbf{v}_S = 0 \text{ en } x = 0 \text{ et en } x = 1.$$

7.2.2 Etats stationnaires constants

Les états stationnaires doivent vérifier la contrainte $B + D + E + L = 1$ et les inégalités $0 \leq B, E, D, L \leq 1$. Il y a deux solutions stationnaires constantes, à savoir

$$B = D = E = 0, \quad L = 1, \quad \mathbf{v}_S = \mathbf{v}_L = 0 \quad (7.11)$$

et

$$\bar{B} = \frac{1 - \frac{k_D}{k_B}}{1 + \alpha \frac{k_D}{k_N} + \frac{k_E \cdot k_D}{\varepsilon \cdot k_B}}, \quad \bar{E} = \frac{k_E k_D}{\varepsilon k_B} \bar{B}, \quad \bar{D} = \alpha \frac{k_D}{k_N} \bar{B}, \quad \bar{L} = \frac{k_D}{k_B}, \quad \mathbf{v}_S = \mathbf{v}_L = 0. \quad (7.12)$$

On remarque que $L = 0$ ne donne pas de solution stationnaire constante et on peut donc supposer que $L \neq 0$.

7.2.3 Stabilité linéaire des états stationnaires

On commence par étudier la stabilité linéaire des états stationnaires (7.11) et (7.12) pour la partie source du système (7.10), c'est-à-dire pour le système

$$\begin{cases} \partial_t B = k_B B L - k_D B, \\ \partial_t E = k_E B L - \varepsilon E, \\ \partial_t D = \alpha k_D B - k_N D, \end{cases} \quad (7.13)$$

avec $k_B, k_D, k_E, \varepsilon > 0$. En linéarisant le système et en utilisant le critère de Routh-Hurwitz, on montre le résultat de stabilité des solutions stationnaires suivant [Rs2] :

Proposition 7.1 – *La solution stationnaire (7.11) est stable pour le système (7.13) ssi $k_D > k_B$.
– La solution stationnaire (7.12) est toujours stable pour le système (7.13).*

Le premier point montre que le liquide devient dominant partout, sans biofilm si et seulement si le taux de mort des cyanobactéries est plus grand que leur taux de naissance.

Nous étudions maintenant la stabilité des solutions stationnaires pour le système hyperbolique complet (7.10), que nous linéarisons autour des solutions stationnaires. Avec un développement en série de Fourier approprié, nous montrons le résultat suivant [Rs2] :

Proposition 7.2 *La solution stationnaire (7.12) est toujours linéairement stable pour le système hyperbolique complet (7.10)*

7.3 Difficultés numériques

Nous résolvons maintenant le système complet (7.7) en 2D par une discrétisation aux différences finies en espace et une méthode explicite-implicite en temps, afin de traiter les phases qui peuvent s'annuler. Cette méthode est valide quelle que soit la dimension.

Considérons un carré $\Omega = [0, L] \times [0, L]$ et la grille de discrétisation $x_\alpha = (\alpha_1 \Delta x, \alpha_2 \Delta x)$, où α_1, α_2 sont des entiers tels que $0 \leq \alpha_1, \alpha_2 \leq N + 1$ et Δx est le pas d'espace. Nous appelons Δt le pas de temps et $t_n = n \Delta t$, $n \in \mathbb{N}$ les temps de discrétisation.

Le système hyperbolique (7.7) peut se réécrire comme

$$\partial_t \mathbf{W} + \partial_{x_1} A_1(\mathbf{W}) + \partial_{x_2} A_2(\mathbf{W}) = \mathbf{F}_{masse} + \mathbf{F}_{force} + \mathbf{F}_{pression},$$

avec

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} B \\ D \\ E \\ (1-L)\mathbf{v}_{S1} \\ (1-L)\mathbf{v}_{S2} \\ L\mathbf{v}_{L1} \\ L\mathbf{v}_{L2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_{masse} = \begin{pmatrix} B(k_B L - k_D) \\ \alpha k_D B - k_N D \\ k_E B L - \varepsilon E \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{F}_{force} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ (M - \Gamma_L)\mathbf{v}_{L1} - M\mathbf{v}_{S1} \\ (M - \Gamma_L)\mathbf{v}_{L2} - M\mathbf{v}_{S2} \\ -(M - \Gamma_L)\mathbf{v}_{L1} + M\mathbf{v}_{S1} \\ -(M - \Gamma_L)\mathbf{v}_{L2} + M\mathbf{v}_{S2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_{pression} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -(1-L)\partial_x P \\ -(1-L)\partial_y P \\ -L\partial_x P \\ -L\partial_y P \end{pmatrix},$$

$$A_1(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} B\mathbf{v}_{S1} \\ D\mathbf{v}_{S1} \\ E\mathbf{v}_{S1} \\ (1-L)\mathbf{v}_{S1}^2 + \gamma(1-L) \\ (1-L)\mathbf{v}_{S1}\mathbf{v}_{S2} \\ L\mathbf{v}_{L1}^2 \\ L\mathbf{v}_{L1}\mathbf{v}_{L2} \end{pmatrix}, \quad A_2(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} B\mathbf{v}_{S2} \\ D\mathbf{v}_{S2} \\ E\mathbf{v}_{S2} \\ (1-L)\mathbf{v}_{S1}\mathbf{v}_{S2} \\ (1-L)\mathbf{v}_{S2}^2 + \gamma(1-L) \\ L\mathbf{v}_{L1}\mathbf{v}_{L2} \\ L\mathbf{v}_{L2}^2 \end{pmatrix},$$

où $\mathbf{v}_L = (\mathbf{v}_{L1}, \mathbf{v}_{L2})^T$ et $\mathbf{v}_S = (\mathbf{v}_{S1}, \mathbf{v}_{S2})^T$. La partie source est décomposée en trois termes distincts.

On appelle $\mathbf{W}^{n,\alpha}$ l'approximation de \mathbf{W} au point $x_\alpha \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ et au temps t_n . Le schéma final que nous utilisons se base sur le schéma suivant, provenant d'une méthode de relaxation [6] et qui ressemble au schéma de Rusanov :

$$\begin{aligned} \mathbf{W}^{n+1,\alpha} &= \mathbf{W}^{n,\alpha} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \sum_{j=1,2} (A_j(\mathbf{W}^{n,\alpha_j+1}) - A_j(\mathbf{W}^{n,\alpha_j-1})) \\ &+ \lambda \frac{\Delta t}{4\Delta x} \sum_{j=1,2} (\mathbf{W}^{n,\alpha_j+1} - 2\mathbf{W}^{n,\alpha} + \mathbf{W}^{n,\alpha_j-1}) + \Delta t \mathbf{F}_{masse}^{n,\alpha} + \Delta t \mathbf{F}_{force}^{n,\alpha} + \Delta t \mathbf{F}_{pression}^{n,\alpha}, \end{aligned} \quad (7.14)$$

où la notation $\alpha_1 \pm 1$ (resp. $\alpha_2 \pm 1$) désigne le bi-indice $(\alpha_1 \pm 1, \alpha_2)$ (resp. $(\alpha_1, \alpha_2 \pm 1)$) et où λ le maximum des valeurs propres des matrices Jacobiennes de A_1 et A_2 . La condition de stabilité est également donnée par $\lambda \frac{\Delta t}{\Delta x} \leq 1$.

7.3.1 Problème de l'annulation de phase

Le calcul du schéma (7.14) nous donne les deux quantités $(1 - L^{n+1})\mathbf{v}_S^{n+1}$ et $L^{n+1}\mathbf{v}_L^{n+1}$, alors qu'il nous faut \mathbf{v}_S^{n+1} et \mathbf{v}_L^{n+1} pour calculer les quatre dernières composantes de $\mathbf{F}_{force}^{n+1,\alpha}$ au temps t_{n+2} . Ainsi, lorsque L^{n+1} est égal à 1 (resp. 0), nous ne pouvons pas calculer \mathbf{v}_S^{n+1} (resp. \mathbf{v}_L^{n+1}) grâce au schéma ci-dessus. De plus, nous ne pouvons pas nous contenter de considérer des données qui évitent ces valeurs critiques, car les zones de liquide pur (correspondant à $L = 1$) ou de biofilm pur (correspondant à $L = 0$) sont pertinentes dans notre étude.

Pour résoudre ce problème, nous utilisons une discrétisation implicite pour les vitesses des termes sources, tout en laissant inchangée la discrétisation des équations de conservation de la masse (7.1). Concrètement, on remplace le terme $\mathbf{F}_{force}^{n,\alpha}$ par $\mathbf{F}_{force}^{n+1,\alpha}$ dans le schéma (7.14). Il nous reste à résoudre un système de deux équations linéaires, ce qui est possible sans restriction si $\Gamma_L^{n+1,j} < M$ et pour Δt assez petit si $\Gamma_L^{n+1,j} > M$.

7.3.2 Traitement du terme de pression

Afin de calculer l'inconnue P pour laquelle on n'a pas d'équation explicite, on utilise une méthode de projection, inspirée de celle proposée dans [47, 154] pour les équations de Navier-Stokes. Un premier pas de prédiction nous donne des vitesses estimées et un second pas permet de calculer P , en résolvant l'équation elliptique sur ∇P :

$$\Delta t \Delta \nabla P^{n+1} = \nabla \nabla \cdot ((1 - L^{n+1})\mathbf{v}_S^{n+1/2} + L^{n+1}\mathbf{v}_L^{n+1/2}),$$

tout en imposant la contrainte d'incompressibilité (7.4). Le calcul de la pression permet de corriger les valeurs des vitesses comme suit :

$$\mathbf{v}_S^{n+1} = \mathbf{v}_S^{n+1/2} - \Delta t \nabla P^{n+1}, \quad \mathbf{v}_L^{n+1} = \mathbf{v}_L^{n+1/2} - \Delta t \nabla P^{n+1}.$$

7.4 Choix des paramètres

Une grande difficulté avant d'effectuer des simulations numériques du modèle proposé est d'estimer tous les paramètres du modèle, en l'absence d'expériences reproduisant le phénomène étudié. Nous avons donc cherché dans la littérature pour trouver les paramètres présents à la table 7.1 ; on notera que les paramètres estimés le sont le plus souvent pour des cyanobactéries sous forme planctonique, et non sous forme de biofilms, et que les taux de croissance et autres paramètres peuvent être différents dans ces deux situations. Pour le moment, il existe encore peu d'articles correspondant au cas biofilm et des expériences dans ce sens seraient les bienvenues. Enfin, nous étudions la sensibilité de ces paramètres afin d'estimer leur influence dans les simulations proposées.

7.4.1 Estimation des paramètres

Un paramètre important qui n'est pas estimé en pratique est le paramètre γ . Comme $\sqrt{\gamma}$ joue le rôle de la vitesse de propagation de front du mélange, on estime $\sqrt{\gamma} = \frac{10^{-4}}{3600} [cm/sec] \approx 2.7 \cdot 10^{-8} [cm/sec]$, en se basant sur une croissance de 1 mm en 30 jours [167]. Dans la suite, on étudiera la dépendance en ce paramètre.

TABLE 7.1 – Estimation des paramètres

Paramètre	Valeur	Description	Référence
k_{B0}	$8 \cdot 10^{-6}$ [1/sec]	Taux de croissance cyanobactéries	[122, 155, 105]
k_D	$2 \cdot 10^{-7}$ [1/sec]	Taux de croissance de D	[122]
k_E	$12 \cdot 10^{-6}$ [1/sec]	Taux de croissance de l'EPS	[126]
ε	$1 \cdot 10^{-7}$ [1/sec]	Taux de perte de l'EPS	
k_N	$1 \cdot 10^{-6}$ [1/sec]	Taux de perte de D	
γ	$5 \cdot 10^{-16}$ [cm ² /sec ²]	Coefficient du tenseur des contrainte	
α	0.25 [dimensionless]	Fraction de cellules mortes	
M	10^{-8} [1/sec]	Coefficient d'interaction	
I_{opt}	0.01 [$\mu\text{mol} \cdot \text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$]	Intensité lumineuse optimale	[52, 60]
I_0	0.01 [$\mu\text{mol} \cdot \text{cm}^{-2} \text{sec}^{-1}$]	Lumière incidente moyenne	[52, 60]
w	1 [dimensionless]	Constante liée à la lumière	[71, 155]
β	0.1 [dimensionless]	Constante liée à la lumière	[167]
μ_0	0.002 [cm ⁻¹]	Coefficient d'absorption de la lumière	[152]
μ_h	6 [dimensionless]	Coefficient d'absorption de la lumière	[167]

7.4.2 Sensitivité des paramètres

Il est à noter que les paramètres estimés à la sous-section précédente 7.4.1 sont tirés d'articles où ces paramètres ont été estimés dans des situations différentes de notre étude, par exemple pour des cyanobactéries en suspension et non en biofilm. L'étude de sensibilité permet de quantifier la variation des résultats obtenus en fonction des variations des valeurs des paramètres et de pouvoir ainsi sélectionner les paramètres sensibles. Pour cela, on considère le modèle en 2D sur le carré $[0, 5] \times [0, 5]$ et les 2 sorties suivantes : volume total de cyanobactéries et de la phase totale solide au bout de 30 jours. Les paramètres testés sont les suivants : la température T , l'intensité lumineuse à la surface de l'eau I_0 et les paramètres γ , M , k_{B0} , k_E , k_D , ε , k_N et α . Les résultats sont donnés à la table 7.4.2 et on déduit que les paramètres k_{B0} et dans une moindre mesure k_E et γ sont ceux ayant la plus grande influence sur le résultat final de nos simulations. Une étude de robustesse corrobore ces résultats.

7.5 Simulations numériques

7.5.1 Cas 1D

Nous commençons avec le cas mono-dimensionnel, qui n'est pas réaliste en pratique mais qui permet de tester simplement le modèle. Ici la seule variable d'espace que nous considérons est la hauteur, en supposant le biofilm homogène en les autres coordonnées. Nous étudions ainsi deux points, à savoir l'influence de la lumière et l'influence du paramètre γ .

A la figure 7.2, nous pouvons comparer les fonctions B , D , E , L au bout de 60 jours dans 6 configurations différentes : pour 3 valeurs différentes de γ et 2 conditions de lumière différentes. Nous remarquons effectivement l'influence de ces deux paramètres : dans le cas de la lumière variable, la proportion de cyanobactéries est moindre au profit de la proportion d'EPS. Pour ce qui est du coefficient γ , nous notons que plus γ est grand et plus le front se déplace rapidement. Ceci est confirmé par l'expérience numérique suivante. En effet, à la figure 7.3, nous voyons le déplacement du front en fonction du temps pour différentes valeurs du paramètre γ et à droite, la vitesse du front en fonction de $\sqrt{\gamma}$. La vitesse de déplacement du front, et donc de propagation du biofilm, a l'air relativement linéaire en $\sqrt{\gamma}$.

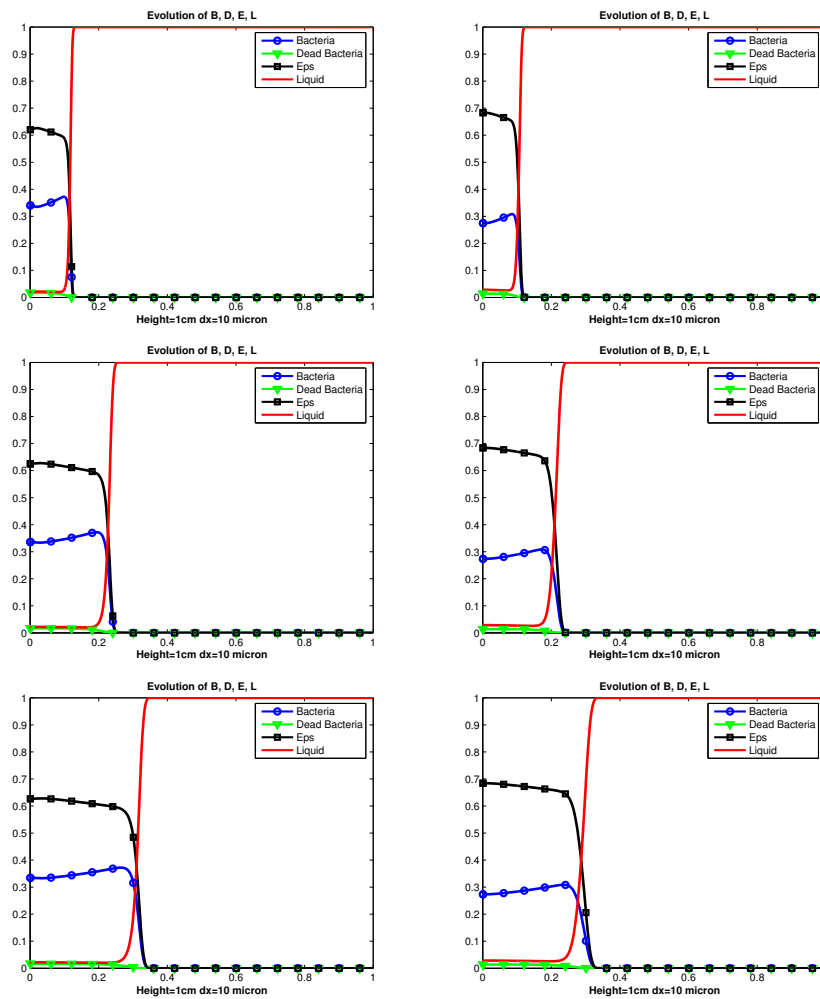


FIGURE 7.2 – Fractions de volume B (bleu), D (vert), E (noir), L (rouge) pour 3 valeurs de γ , $\gamma_1 = 10^{-16} \text{ (cm}^2/\text{sec}^2)$ (en haut), $\gamma_2 = 5 \cdot 10^{-16} \text{ (cm}^2/\text{sec}^2)$ (au milieu), $\gamma_3 = 10^{-15} \text{ (cm}^2/\text{sec}^2)$ (en bas). A gauche, avec un taux de croissance constant $k_B = k_{B0}$ et à droite, avec un taux dépendant de l'intensité lumineuse suivant un cycle jour-nuit.

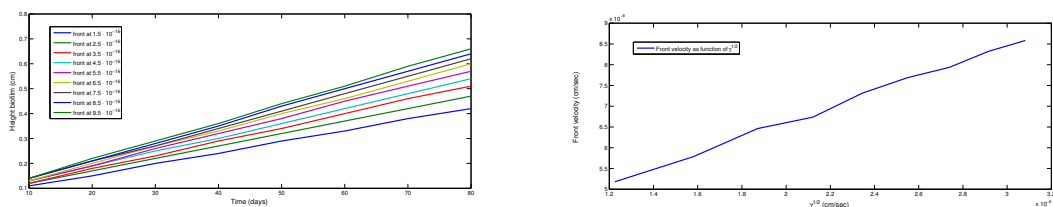


FIGURE 7.3 – A gauche, hauteur du biofilm (en cm) en fonction du temps (en jours) pour différentes valeurs de γ entre $1.5 \cdot 10^{-16}$ et $9.5 \cdot 10^{-16} \text{ (cm}^2/\text{sec}^2)$. A droite, la vitesse du front (en cm/s) en fonction de $\sqrt{\gamma}$ (en cm/s) .

Paramètres	V_{bio}	S_{bio}	V_B	S_B
Sans variation	0.2441	0	0.0745	0
$k_{B0} + \delta$	+8.26%	1.65	+11.39%	2.28
$k_{B0} - \delta$	-8.05%	1.61	-10.84%	2.17
$k_E + \delta$	+0.36%	0.07	-2.84%	0.57
$k_E - \delta$	-0.35%	0.07	+2.99%	0.60
$k_N + \delta$	+0.013%	0.0027	-0.013%	0.0025
$k_N - \delta$	+0.014%	0.0028	-0.013%	0.0026
$k_D + \delta$	-0.27%	0.054	-0.92%	0.184
$k_D - \delta$	+0.3%	0.06	+0.9%	0.181
$\varepsilon + \delta$	-0.053%	0.011	+0.07%	0.014
$\varepsilon - \delta$	+0.08%	0.016	-0.095%	0.019
$M + \delta$	-0.13%	0.026	-0.13%	0.026
$M - \delta$	+0.16%	0.032	+0.11%	0.028
$\gamma + \delta$	+1.24%	0.247	+0.97%	0.195
$\gamma - \delta$	-1.24%	0.248	-1.03%	0.206
$T + \delta$	-0.16%	0.0325	-0.25%	0.0506
$T - \delta$	-0.18%	0.0362	-0.28%	0.056
$I_0 + \delta$	+0.38%	0.076	+1.72%	0.345
$I_0 - \delta$	-0.74%	0.149	-2.26%	0.452

TABLE 7.2 – Etude de sensibilité avec $\delta = 5\%$. Pour chaque sortie, on donne la variation de volume et le paramètre de sensibilité, i.e. le ratio entre la variation relative de la sortie et la variation relative du paramètre.

7.5.2 Cas 2D et 3D

Nous effectuons également des simulations numériques en 2D au bout de 30 jours, elles sont présentées à la figure 7.4. Nous observons que l'intensité lumineuse est bien absorbée par la biomasse elle-même.

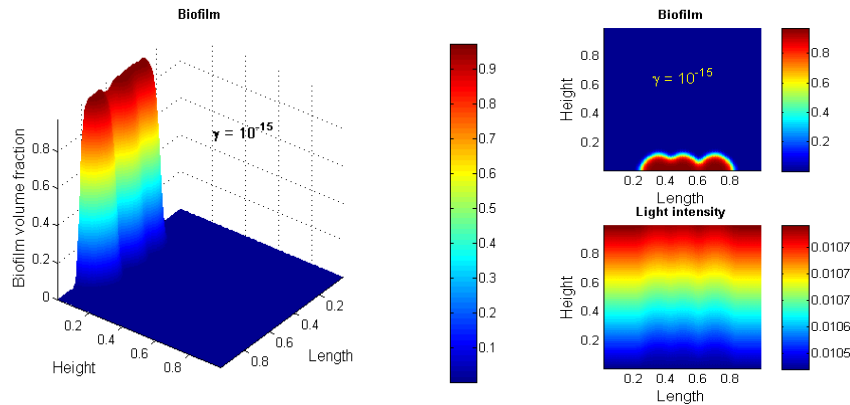


FIGURE 7.4 – Evolution du biofilm en 2D. À gauche, la fraction de volume B ; à droite en haut, les courbes de niveau de B et à droite en bas, les courbes de niveau de l'intensité lumineuse (en $\mu\text{mol cm}^{-2}\text{sec}^{-1}$).

Finalement, dans le cas 3D, nous présentons des simulations numériques de l'évolution du biofilm, effectuées en lumière variable. On représente à la figure 7.5 à la fois l'évolution des cyanobactéries, à gauche, et l'évolution de l'intensité lumineuse, à droite. Bien qu'il ne soit

pas possible pour le moment de faire de comparaisons directes avec des expériences, l'ordre de grandeur de la hauteur de biofilms que l'on trouve, environ 1mm après 30 jours est cohérent avec les expériences mentionnées dans la littérature [52, 60, 152] .

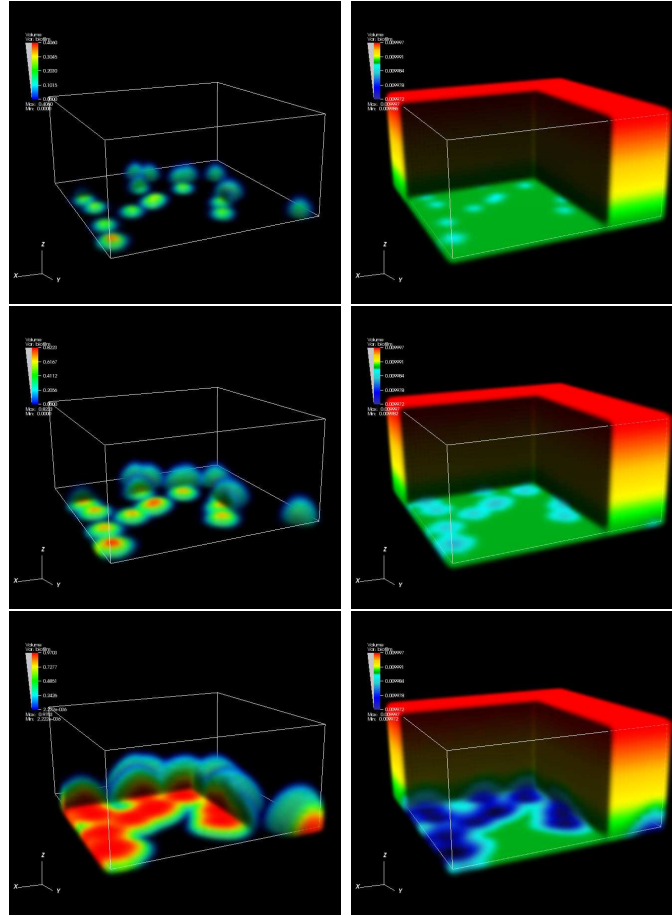


FIGURE 7.5 – Evolution du biofilm en 3D à 3 temps différents ($T = 15, 22, 30$ jours). A gauche, évolution de la fraction de volume de cyanobactéries B et à droite, variation de l'intensité lumineuse.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté, puis étudié un nouveau modèle hydrodynamique de biofilms basé sur la théorie des mélanges et prenant en compte la dépendance spatiale. Ce modèle est adapté au cas particulier de la croissance de biofilms de cyanobactéries au fond de fontaines, et une dépendance des coefficients du modèle en la lumière a été présentée. Une étape importante consiste à estimer les paramètres à travers la littérature, puis à étudier l'influence de ceux-ci sur les solutions du modèle. Des simulations numériques effectuées en dimensions 1, 2 et 3 ont enfin permis de valider le modèle proposé.

Chapitre 8

Travaux en cours et perspectives

Nous concluons cette deuxième partie par quelques développements et perspectives sur les modèles de biofilms.

Comparaison avec des expériences ; application du modèle de formation de biofilms à d'autres contextes

Tout d'abord, nous espérons pouvoir comparer les simulations numériques de ce modèle avec des expériences faites par Francesca di Pippo et Roberta Congestri à l'Université Tor Vergata, à Rome, biologistes à l'aide de qui nous avons mis au point le modèle. Le système d'EDPs utilisé pourrait aussi être approfondi en essayant de voir ce que donnerait un tenseur des contraintes visco-élastique de type Navier-Stokes à la place du tenseur linéaire utilisé ici. On espère que ce changement permettrait de reproduire les comportements turbulents observés dans les biofilms.

Ensuite, dans le cadre de la thèse de Bastien Polizzi, nous travaillons avec Olivier Bernard de l'INRIA Sophia Antipolis & Laboratoire Océanographique de Villefranche sur Mer à l'extension du modèle proposé à des biofilms de micro-algues sur des dispositifs en mouvement. En effet, les micro-algues sont considérées comme une source future de biocarburant à travers les lipides qu'elles produisent. L'objectif poursuivi est alors de faire croître des micro-algues en mode biofilm et non en phase planctonique afin de les récolter plus facilement. L'adaptation du modèle demande donc plusieurs étapes : nombre de phases plus important incluant le nitrate ; prise en compte de la spécificité des micro-algues à travers la photosynthèse, la respiration et les différentes réactions chimiques ; description de la dépendance par rapport aux nutriments, comme l'oxygène ou le carbone inorganique... Enfin, l'idée serait de modéliser la formation de ces biofilms sur des dispositifs tournants afin d'optimiser l'apport de lumière qu'ils reçoivent.

Une autre collaboration est prévue avec le Laboratoire Jacques - Louis Lions de Paris 6 (Benoît Perthame, Luis Almeida et Nicolas Vauchelet) et l'INRA Jouy en Josas (équipe de Laurent Tournier et Vincent Fromion) : il s'agit de modéliser la formation de biofilms bactériens de type *Bacillus Subtilis*, pour lesquels des populations cellulaires différenciées ont été identifiées. Le but est de comprendre comment fonctionne la communication inter-cellulaire entre cellules de phénotypes distincts. Des résultats d'expérience seront fournis par l'équipe de l'INRA et un projet d'ANR interdisciplinaire a été déposé avec ce programme cette année.

Une dernière extension du modèle pourrait être un couplage des modèles de chimiotactisme et des modèles de biofilms étudiés. On pourrait chercher à reproduire les expériences de [138, 144] en modélisant l'importance du chimiotactisme pour la formation de biofilms.

Pour toutes ces collaborations, il faut tout d'abord adapter le modèle proposé au contexte biologique précis, estimer les paramètres dans ce cadre et enfin effectuer une comparaison quantitative des résultats fournis par les simulations numériques avec les résultats expérimentaux. Il est à noter que de nouveaux contacts ont été noués ou repris lors d'une conférence interdisci-

plinaire sur les biofilms organisée en Juin 2014 à Nice, conjointement avec Agnese Seminara et Nelly Henry, deux physiciennes spécialistes des biofilms et nous espérons que ces contacts nous permettront de confronter le modèle développé à de nouvelles situations expérimentales.

Extension à un modèle de propagation des algues en Mer Méditerranée

Enfin, un des objets de la thèse de Bastien Polizzi concerne l'extension du modèle de la formation de biofilms à un modèle de prolifération des algues *Ostreopsis Ovata*.

Ces algues sont présentes depuis une dizaine d'années sur les côtes de la Mer Méditerranée. Elles se développent au fond de l'eau sous la forme d'un biofilm et profitent de conditions favorables de température et de lumière en été pour se développer rapidement, se propager dans l'eau et former des macro-algues, puis se disperser dans l'air. Les conséquences sont importantes pour l'éco-système environnant ainsi que pour la santé humaine (problèmes respiratoires ou cardiaques). Cette recherche a débuté après des discussions avec des chercheurs du Laboratoire d'Océanographie de Villefranche sur Mer.

La modélisation de ce phénomène doit donc coupler deux aspects différents que l'on considère dans deux domaines distincts : sur une fine couche au fond de l'eau, on utilise le modèle de formation de biofilms pour quantifier le développement des algues et dans le reste de la mer, on utilise des équations cinétiques de coagulation-fragmentation afin de rendre compte de l'agrégation des micro-algues en macro-algues. Dans cette partie, les algues peuvent nager et se propager en particulier à l'aide des courants marins.

Nous réfléchissons donc avec Bastien Polizzi et Thierry Goudon sur comment imposer les conditions aux bords pour un tel couplage cinétique-hyperbolique entre deux domaines et comment coupler efficacement deux schémas numériques adaptés, un sur chaque domaine. Plusieurs pistes doivent être étudiées : modification du schéma en un schéma volume fini pour permettre des géométries plus réalistes, utilisation d'une formulation cinétique pour le modèle sur les biofilms afin d'avoir une formulation homogène sur les deux régions ou, au contraire, comparaison du modèle cinétique-hyperbolique proposé avec un couplage de deux systèmes hyperboliques sur les deux domaines.

Bibliographie

- [1] E. Alpkvist and I. Klapper. A multidimensional multispecies continuum model for heterogeneous biofilm development. *Bulletin of mathematical biology*, 69(2) :765–789, 2007.
- [2] D. Ambrosi and L. Preziosi. On the closure of mass balance models for tumor growth. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 12(5) :737–754, 2002.
- [3] B. Andreianov, M. Bendahmane, and M. Saad. Finite volume methods for degenerate chemotaxis model. *J. Comput. Appl. Math.*, 235(14) :4015–4031, 2011.
- [4] K. Anguige, J. King, and J. Ward. A multi-phase mathematical model of quorum sensing in a maturing *pseudomonas aeruginosa* biofilm. *Math. Biosci.*, 203(2) :240–276, 2006.
- [5] D. Aregba-Driollet, M. Briani, and R. Natalini. Asymptotic high-order schemes for 2×2 dissipative hyperbolic systems. *SIAM J. Numer. Anal.*, 46(2) :869–894, 2008.
- [6] D. Aregba-Driollet and R. Natalini. Discrete kinetic schemes for multidimensional systems of conservation laws. *SIAM J. Numer. Anal.*, 37(6) :1973–2004 (electronic), 2000.
- [7] D. Aregba-Driollet, R. Natalini, and S. Tang. Explicit diffusive kinetic schemes for nonlinear degenerate parabolic systems. *Math. Comp.*, 73(245) :63–94 (electronic), 2004.
- [8] S. Astanin and L. Preziosi. Multiphase models of tumour growth. In *Selected topics in cancer modeling*, Model. Simul. Sci. Eng. Technol., pages 223–253. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 2008.
- [9] E. Audusse, F. Bouchut, M-O. Bristeau, R. Klein, and B. Perthame. A fast and stable well-balanced scheme with hydrostatic reconstruction for shallow water flows. *SIAM J. Sci. Comput.*, 25(6) :2050–2065 (electronic), 2004.
- [10] M. Bardi, M. Falcone, and P. Soravia. Numerical methods for pursuit-evasion games via viscosity solutions. In *Stochastic and differential games*, volume 4 of *Ann. Internat. Soc. Dynam. Games*, pages 105–175. Birkhäuser Boston, Boston, MA, 1999.
- [11] J. Bedrossian. Global minimizers for free energies of subcritical aggregation equations with degenerate diffusion. *Appl. Math. Lett.*, 24(11) :1927–1932, 2011.
- [12] J. Bedrossian, N. Rodríguez, and A. L. Bertozzi. Local and global well-posedness for aggregation equations and Patlak-Keller-Segel models with degenerate diffusion. *Nonlinearity*, 24(6) :1683–1714, 2011.
- [13] H. Berestycki and J.-P. Nadal. Self-organised critical hot spots of criminal activity. *European J. Appl. Math.*, 21(4-5) :371–399, 2010.
- [14] C. Berthon, A. Crestetto, and F. Foucher, 2014. En préparation.
- [15] C. Berthon and F. Foucher. Efficient well-balanced hydrostatic upwind schemes for shallow-water equations. *J. Comput. Phys.*, 231(15) :4993–5015, 2012.
- [16] C. Berthon and R. Turpault. Asymptotic preserving HLL schemes. *Numer. Methods Partial Differential Equations*, 27(6) :1396–1422, 2011.
- [17] A. Bertozzi, J. A. Carrillo, and T. Laurent. Blow-up in multidimensional aggregation equations with mildly singular interaction kernels. *Nonlinearity*, 22(3) :683–710, 2009.
- [18] A. Bertozzi, T. Laurent, and F. Léger. Aggregation and spreading via the Newtonian potential : the dynamics of patch solutions. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 22(suppl. 1) :1140005, 39, 2012.
- [19] A. Bertozzi, T. Laurent, and J. Rosado. L^p theory for the multidimensional aggregation equation. *Comm. Pure Appl. Math.*, 64(1) :45–83, 2011.
- [20] S. Bianchini, B. Hanouzet, and R. Natalini. Asymptotic behavior of smooth solutions for partially dissipative hyperbolic systems with a convex entropy. *Comm. Pure Appl. Math.*, 60(11) :1559–1622, 2007.
- [21] P. Biler, I. Guerra, and G. Karch. Large global-in-time solutions of the parabolic-parabolic Keller-Segel system on the plane. *ArXiv e-prints 1401.7650*, jan 2014.

- [22] A. Blanchet, J. Dolbeault, and B. Perthame. Two-dimensional Keller-Segel model : optimal critical mass and qualitative properties of the solutions. *Electron. J. Differential Equations*, pages No. 44, 32 pp. (electronic), 2006.
- [23] R. Borsche, S. Göttlich, A. Klar, and P. Schillen. The scalar Keller-Segel model on networks. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 24(2) :221–247, 2014.
- [24] R. Botchorishvili, B. Perthame, and A. Vasseur. Equilibrium schemes for scalar conservation laws with stiff sources. *Math. Comp.*, 72(241) :131–157 (electronic), 2003.
- [25] F. Bouchut. Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws, and well-balanced schemes for sources. In *Nonlinear stability of finite volume methods for hyperbolic conservation laws, and well-balanced schemes for sources*, Frontiers in Mathematics. Birkhauser, 2004.
- [26] F. Bouchut, H. Ounaissa, and B. Perthame. Upwinding of the source term at interfaces for Euler equations with high friction. *Comput. Math. Appl.*, 53(3-4) :361–375, 2007.
- [27] N. Bournaveas and V. Calvez. Critical mass phenomenon for a chemotaxis kinetic model with spherically symmetric initial data. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 26(5) :1871–1895, 2009.
- [28] N. Bournaveas, V. Calvez, S. Gutiérrez, and B. Perthame. Global existence for a kinetic model of chemotaxis via dispersion and Strichartz estimates. *Comm. Partial Differential Equations*, 33(1-3) :79–95, 2008.
- [29] M. Burger, M. Di Francesco, and M. Franek. Stationary states of quadratic diffusion equations with long-range attraction. *Commun. Math. Sci.*, 11(3) :709–738, 2013.
- [30] M. Burger, R. Fetecau, and Y. Huang. Stationary states and asymptotic behavior of aggregation models with nonlinear local repulsion. *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.*, 13(1) :397–424, 2014.
- [31] V. Calvez and J. A. Carrillo. Volume effects in the Keller-Segel model : energy estimates preventing blow-up. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 86(2) :155–175, 2006.
- [32] V. Calvez and L. Corrias. The parabolic-parabolic Keller-Segel model in \mathbb{R}^2 . *Commun. Math. Sci.*, 6(2) :417–447, 2008.
- [33] V. Calvez, L. Corrias, and M. A. Ebde. Blow-up, concentration phenomenon and global existence for the Keller-Segel model in high dimension. *Comm. Partial Differential Equations*, 37(4) :561–584, 2012.
- [34] J. A. Carrillo, Y.-P. Choi, and M. Hauray. The derivation of Swarming models : Mean-field limit and Wasserstein distances. In *Collective Dynamics from Bacteria to Crowds : An Excursion Through Modeling, Analysis and Simulation Series*, volume 553, pages 1–46. CISM International Centre for Mechanical Sciences, 2014.
- [35] J. A. Carrillo, S. Hittmeir, and A. Jüngel. Cross diffusion and nonlinear diffusion preventing blow up in the Keller-Segel model. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 22(12) :1250041, 35, 2012.
- [36] J. A. Carrillo and B. Yan. An asymptotic preserving scheme for the diffusive limit of kinetic systems for chemotaxis. *Multiscale Model. Simul.*, 11(1) :336–361, 2013.
- [37] J.A. Carrillo, A. Chertock, and Y. Huang. A finite-volume method for nonlinear nonlocal equations with a gradient flow structure. *Comm. in Comp. Phys.*, 17 :233–258, 2015.
- [38] F. Cavalli, A. Gamba, G. Naldi, M. Semplice, D. Valdembrì, and G. Serini. 3D simulations of early blood vessel formation. *J. Comput. Phys.*, 225(2) :2283–2300, 2007.
- [39] C. Chalons, F. Coquel, E. Godlewski, P.-A. Raviart, and N. Seguin. Godunov-type schemes for hyperbolic systems with parameter-dependent source. The case of Euler system with friction. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 20(11) :2109–2166, 2010.
- [40] C. Chalons, M. Girardin, and S. Kokh. Large time step and asymptotic preserving numerical schemes for the gas dynamics equations with source terms. *SIAM J. Sci. Comput.*, 35(6) :A2874–A2902, 2013.
- [41] F. Chalub, P. Markowich, B. Perthame, and C. Schmeiser. Kinetic models for chemotaxis and their drift-diffusion limits. *Monatsh. Math.*, 142(1-2) :123–141, 2004.
- [42] S. Chandrasekhar. Brownian motion, dynamical friction and stellar dynamics. *Rev. Mod. Physics*, 21 :383–388, 1949.
- [43] A. Chauviere and L. Preziosi. Mathematical framework to model migration of cell population in extracellular matrix,. In *Cell mechanics. From single scale-based models to multiscale modeling*, pages 285–318. A. Chauviere, L. Preziosi and C. Verdier Eds., Taylor & Francis Group, CRC Press publisher, 2010.
- [44] Y. Chen and T. Kolokolnikov. A minimal model of predator–swarm interactions. *Journal of The Royal Society Interface*, 11(94) :20131208, 2014.

- [45] B. Chen-Charpentier. Numerical simulation of biofilm growth in porous media. *J. Comput. Appl. Math.*, 103(1) :55–66, 1999. Applied and computational topics in partial differential equations (Gramado, 1997).
- [46] E. Chong, T. Phan, I. Lim, Y. Zhang, B. Bay, S. Ramakrishna, and C. Lim. Evaluation of electrospun pcl/gelatin nanofibrous scaffold for wound healing and layered dermal reconstitution. *Acta biomaterialia*, 3(3) :321–330, 2007.
- [47] A. Chorin. Numerical solution of the Navier-Stokes equations. *Math. Comp.*, 22 :745–762, 1968.
- [48] T. Cieřlak and P. Laurençot. Finite time blow-up for a one-dimensional quasilinear parabolic-parabolic chemotaxis system. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 27(1) :437–446, 2010.
- [49] N. Cogan, J. Gunn, and D. Wozniak. Biofilms and infectious diseases : biology to mathematics and back again. *FEMS microbiology letters*, 322(1) :1–7, 2011.
- [50] N. Cogan and J. Keener. The role of the biofilm matrix in structural development. *Mathematical Medicine and Biology*, 21(2) :147–166, 2004.
- [51] N. Cogan, B. Szomolay, and M. Dindos. Effect of periodic disinfection on persisters in a one-dimensional biofilm model. *Bull. Math. Biol.*, 75(1) :94–123, 2013.
- [52] R. Congestri, F. Di Pippo, R. De Philippis, I. Buttino, G. Paradossi, and P. Albertano. Seasonal succession of phototrophic biofilms in an italian wastewater treatment plant : biovolume, spatial structure and exopolysaccharides. *Aquatic microbial ecology*, 45(3) :301–312, 2006.
- [53] J. Costerton, G. Geesey, and K. Cheng. How bacteria stick. *Scientific American*, 238(1) :86–95, 1978.
- [54] C. Crispim and C. Gaylarde. Cyanobacteria and biodeterioration of cultural heritage : a review. *Microbial ecology*, 49(1) :1–9, 2005.
- [55] R. Dáger and E. Zuazua. *Wave propagation, observation and control in 1-d flexible multi-structures*, volume 50 of *Mathématiques & Applications (Berlin) [Mathematics & Applications]*. Springer-Verlag, Berlin, 2006.
- [56] Y. Deng, T.-P. Liu, T. Yang, and Z. Yao. Solutions of Euler-Poisson equations for gaseous stars. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 164(3) :261–285, 2002.
- [57] L. Derbel and P-E. Jabin. The set of concentration for some hyperbolic models of chemotaxis. *J. Hyperbolic Differ. Equ.*, 4(2) :331–349, 2007.
- [58] M. Di Francesco and D. Donatelli. Singular convergence of nonlinear hyperbolic chemotaxis systems to Keller-Segel type models. *Discrete and Continuous Dynamical Systems (B)*, 13(1) :79–100, 2010.
- [59] M. Di Francesco and S. Fagioli. Measure solutions for non-local interaction PDEs with two species. *Nonlinearity*, 26(10) :2777–2808, 2013.
- [60] F. Di Pippo, A. Bohn, R. Congestri, R. De Philippis, and P. Albertano. Capsular polysaccharides of cultured phototrophic biofilms. *Biofouling*, 25(6) :495–504, 2009.
- [61] C. Di Russo. Analysis and numerical approximations of hydrodynamical models of biological movements. *Rend. Mat. Appl. (7)*, 32(3-4) :117–367, 2012.
- [62] C. Di Russo and A. Sepe. Existence and asymptotic behavior of solutions to a quasi-linear hyperbolic-parabolic model of vasculogenesis. *SIAM J. Math. Anal.*, 45(2) :748–776, 2013.
- [63] J. Dockery and I. Klapper. Finger formation in biofilm layers. *SIAM J. Appl. Math.*, 62(3) :853–869, 2001/02.
- [64] Y. Dolak and T. Hillen. Cattaneo models for chemosensitive movement : numerical solution and pattern formation. *J Math Biol*, 46(5) :461–78, 2003.
- [65] Y. Dolak and C. Schmeiser. Kinetic models for chemotaxis : hydrodynamic limits and spatio-temporal mechanisms. *J. Math. Biol.*, 51(6) :595–615, 2005.
- [66] Y. Dolak and C. Schmeiser. The Keller-Segel model with logistic sensitivity function and small diffusivity. *SIAM J. Appl. Math*, 66(1) :286–308, 2006.
- [67] J. Dolbeault and B. Perthame. Optimal critical mass in the two-dimensional Keller-Segel model in \mathbb{R}^2 . *C. R. Math. Acad. Sci. Paris*, 339(9) :611–616, 2004.
- [68] H. Eberl, M. Efendiev, D. Wrzosek, and A. Zhigun. Analysis of a degenerate biofilm model with a nutrient taxis term. *Discrete Contin. Dyn. Syst.*, 34(1) :99–119, 2014.
- [69] A. Ebigbo, R. Helmig, A. Cunningham, H. Class, and R. Gerlach. Modelling biofilm growth in the presence of carbon dioxide and water flow in the subsurface. *Advances in Water Resources*, 33(7) :762–781, 2010.
- [70] M. Efendiev, S. Zelik, and H. Eberl. Existence and longtime behavior of a biofilm model. *Commun. Pure Appl. Anal.*, 8(2) :509–531, 2009.

- [71] P. Eilers and J. Peeters. A model for the relationship between light intensity and the rate of photosynthesis in phytoplankton. *Ecological modelling*, 42(3) :199–215, 1988.
- [72] E. Espejo, A. Stevens, and J. J. L. Velázquez. A note on non-simultaneous blow-up for a drift-diffusion model. *Differential Integral Equations*, 23(5-6) :451–462, 2010.
- [73] A. Fasano, A. Mancini, and M. Primicerio. Equilibrium of two populations subject of chemotaxis. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 14(4) :503–533, 2004.
- [74] R. C. Fetecau and Y. Huang. Equilibria of biological aggregations with nonlocal repulsive-attractive interactions. *Phys. D*, 260 :49–64, 2013.
- [75] R. C. Fetecau, Y. Huang, and T. Kolokolnikov. Swarm dynamics and equilibria for a nonlocal aggregation model. *Nonlinearity*, 24(10) :2681–2716, 2011.
- [76] F. Filbet. A finite volume scheme for the Patlak-Keller-Segel chemotaxis model. *Numer. Math.*, 104(4) :457–488, 2006.
- [77] F. Filbet, P. Laurençot, and B. Perthame. Derivation of hyperbolic models for chemosensitive movement. *J. Math. Biol.*, 50(2) :189–207, 2005.
- [78] F. Filbet and C.-W. Shu. Approximation of hyperbolic models for chemosensitive movement. *SIAM J. Sci. Comput.*, 27(3) :850–872 (electronic), 2005.
- [79] F. Filbet and C. Yang. Numerical simulations of kinetic models for chemotaxis. *SIAM J. Sci. Comput.*, 36(3) :B348–B366, 2014.
- [80] A. Friedman, B. Hu, and C. Xue. On a multiphase multicomponent model of biofilm growth. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 211(1) :257–300, 2014.
- [81] M. Garavello and B. Piccoli. *Traffic flow on networks*, volume 1 of *AIMS Series on Applied Mathematics*. American Institute of Mathematical Sciences (AIMS), Springfield, MO, 2006. Conservation laws models.
- [82] L. Gosse. Asymptotic-preserving and well-balanced schemes for the 1D Cattaneo model of chemotaxis movement in both hyperbolic and diffusive regimes. *J. Math. Anal. Appl.*, 388(2) :964–983, 2012.
- [83] L. Gosse. Maxwellian decay for well-balanced approximations of a super-characteristic chemotaxis model. *SIAM J. Scient. Comput.*, 34 :A520–A545, 2012.
- [84] T. Goudon. Hydrodynamic limit for the Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system : analysis of the two-dimensional case. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 15 :737–752, 2005.
- [85] J. Greenberg and W. Alt. Stability results for a diffusion equation with functional drift approximating a chemotaxis model. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 300 :235–258, 1987.
- [86] X. Gu and Z. Lei. Well-posedness of 1-D compressible Euler-Poisson equations with physical vacuum. *J. Differential Equations*, 252(3) :2160–2188, 2012.
- [87] L. Hall-Stoodley, J. Costerton, and P. Stoodley. Bacterial biofilms : from the natural environment to infectious diseases. *Nature Reviews Microbiology*, 2(2) :95–108, 2004.
- [88] B. Harley, H. Kim, M. Zaman, I. Yannas, D. Lauffenburger, and L. Gibson. Microarchitecture of three-dimensional scaffolds influences cell migration behavior via junction interactions. *Biophysical Journal*, 95(8) :4013–4024, 10 2008.
- [89] M. A. Herrero and J.J. L. Velázquez. Singularity patterns in a chemotaxis model. *Math. Ann.*, 306(3) :58–623, 1996.
- [90] M. Herty and M. Seaïd. Assessment of coupling conditions in water way intersections. *Internat. J. Numer. Methods Fluids*, 71(11) :1438–1460, 2013.
- [91] T. Hillen. Hyperbolic models for chemosensitive movement. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 12(7) :1007–1034, 2002. Special issue on kinetic theory.
- [92] T. Hillen. On the L^2 -moment closure of transport equations : the Cattaneo approximation. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 4(4) :961–982, 2004.
- [93] T. Hillen and H. Othmer. The diffusion limit of transport equations derived from velocity-jump processes. *SIAM J. Appl. Math.*, 61(3) :751–775 (electronic), 2000.
- [94] T. Hillen and K. Painter. Global existence for a parabolic chemotaxis model with prevention of overcrowding. *Advances in Applied Mathematics*, 26(4) :280 – 301, 2001.
- [95] T. Hillen and K. Painter. A user’s guide to PDE models for chemotaxis. *J. Math. Biol.*, 58(1-2) :183–217, 2009.
- [96] T. Hillen, C. Rohde, and F. Lutscher. Existence of weak solutions for a hyperbolic model of chemosensitive movement. *J. Math. Anal. Appl.*, 260(1) :173–199, 2001.

- [97] T. Hillen and A. Stevens. Hyperbolic models for chemotaxis in 1-d. *Nonlinear Anal. : Real World Appl.*, 1(3) :409–433, September 2000.
- [98] D. Horstmann. From 1970 until present : the Keller-Segel model in chemotaxis and its consequences. I. *Jahresber. Deutsch. Math.-Verein.*, 105(3) :103–165, 2003.
- [99] D. Horstmann. Generalizing the Keller–Segel model : Lyapunov functionals, steady state analysis, and blow-up results for multi-species chemotaxis models in the presence of attraction and repulsion between competitive interacting species. *J. Nonlinear Sci.*, 21 :231–270, 2011.
- [100] H. Hwang, K. Kang, and A. Stevens. Global solutions of nonlinear transport equations for chemosensitive movement. *SIAM J. Math. Anal.*, 36(4) :1177–1199 (electronic), 2005.
- [101] H. Hwang, K. Kang, and A. Stevens. Global existence of classical solutions for a hyperbolic chemotaxis model and its parabolic limit. *Indiana Univ. Math. J.*, 55(1) :289–316, 2006.
- [102] W. Jäger and S. Luckhaus. On explosions of solutions to a system of partial differential equations modelling chemotaxis. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 329(2) :819–824, 1992.
- [103] J. Jang and N. Masmoudi. Well-posedness for compressible Euler equations with physical vacuum singularity. *Comm. Pure Appl. Math.*, 62(10) :1327–1385, 2009.
- [104] J. Jang and N. Masmoudi. Well and ill-posedness for compressible Euler equations with vacuum. *J. Math. Phys.*, 53(11) :115625, 11, 2012.
- [105] C. Johnson, S. Golden, and T. Kondo. Adaptive significance of circadian programs in cyanobacteria. *Trends in microbiology*, 6(10) :407–410, 1998.
- [106] Th. Katsaounis, B. Perthame, and C. Simeoni. Upwinding sources at interfaces in conservation laws. *Appl. Math. Lett.*, 17(3) :309–316, 2004.
- [107] O. Kedem and A. Katchalsky. Thermodynamic analysis of the permeability of biological membrane to non-electrolytes. *Biochimica et Biophysica Acta*, 27 :229 – 246, 1958.
- [108] E.F. Keller and L.A. Segel. Initiation of slime mold aggregation viewed as an instability. *J. Theor. Biol.*, 26 :399–415, 1970.
- [109] I. Klapper and J. Dockery. Mathematical description of microbial biofilms. *SIAM Rev.*, 52(2) :221–265, 2010.
- [110] R. Kohn and S. Serfaty. Second-order PDE’s and deterministic games. In *ICIAM 07—6th International Congress on Industrial and Applied Mathematics*, pages 239–249. Eur. Math. Soc., Zürich, 2009.
- [111] R. Kowalczyk. Preventing blow-up in a chemotaxis model. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 305(2) :566 – 588, 2005.
- [112] R. Kowalczyk, A. Gamba, and L. Preziosi. On the stability of homogeneous solutions to some aggregation models. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 4(1) :203–220, 2004. Mathematical models in cancer (Nashville, TN, 2002).
- [113] I. Kuffner and V. Paul. Effects of nitrate, phosphate and iron on the growth of macroalgae and benthic cyanobacteria from Cocos Lagoon, Guam. *Marine Ecology Progress Series*, 222 :63–72, 2001.
- [114] C. Laspidou, A. Kungolos, and P. Samaras. Cellular-automata and individual-based approaches for the modeling of biofilm structures : Pros and cons. *Desalination*, 250(1) :390–394, 2010.
- [115] J. Lega and T. Passot. Hydrodynamics of bacterial colonies : a model. *Physical Review E*, 67(3) :031906, 2003.
- [116] D. López, H. Vlamakis, and R. Kolter. Biofilms. *Cold Spring Harbor perspectives in biology*, 2(7) :a000398, 2010.
- [117] A. Mackey, T. Kolokolnikov, and A. Bertozzi. Two-species particle aggregation and stability of co-dimension one solutions. *Discrete Contin. Dyn. Syst. Ser. B*, 19(5) :1411–1436, 2014.
- [118] B. Mandal and S. Kundu. Cell proliferation and migration in silk fibroin 3d scaffolds. *Biomaterials*, 30(15) :2956 – 2965, 2009.
- [119] P. Marcati and A. Milani. The one-dimensional Darcy’s law as the limit of a compressible Euler flow. *J. Differential Equations*, 84(1) :129–147, 1990.
- [120] A. Marigo. Entropic solutions for irrigation networks. *SIAM J. Appl. Math.*, 70(5) :1711–1735, 2009/10.
- [121] A. Marrocco. Numerical simulation of chemotactic bacteria aggregation via mixed finite elements. *M2AN Math. Model. Numer. Anal.*, 37(4) :617–630, 2003.
- [122] E. Morgenroth, D. Noguera, C. Picioreanu, B. Rittmann, M. van Loosdrecht, and O. Wanner. *Mathematical modeling of biofilms*. IWA publishing, 2006.

- [123] J. D. Murray. *Mathematical biology. II*, volume 18 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*. Springer-Verlag, New York, third edition, 2003. Spatial models and biomedical applications.
- [124] T. Nagai and T. Yamada. Large time behavior of bounded solutions to a parabolic system of chemotaxis in the whole space. *J. Math. Anal. Appl.*, 336(1) :704–726, 2007.
- [125] R. Natalini. Convergence to equilibrium for the relaxation approximations of conservation laws. *Comm. Pure Appl. Math.*, 49(8) :795–823, 1996.
- [126] B. Ni, R. Zeng, F. Fang, J. Xu, G. Sheng, and H. Yu. A novel approach to evaluate the production kinetics of extracellular polymeric substances (EPS) by activated sludge using weighted nonlinear least-squares analysis. *Environmental science & technology*, 43(10) :3743–3750, 2009.
- [127] K. Osaki and A. Yagi. Finite dimensional attractor for one-dimensional Keller-Segel equations. *Funkcial. Ekvac.*, 44(3) :441–469, 2001.
- [128] H. Othmer and T. Hillen. The diffusion limit of transport equations. II. Chemotaxis equations. *SIAM J. Appl. Math.*, 62(4) :1222–1250 (electronic), 2002.
- [129] N. Overgaard. Application of variational inequalities to the moving-boundary problem in a fluid model for biofilm growth. *Nonlinear Anal.*, 70(10) :3658–3664, 2009.
- [130] K. Painter and T. Hillen. Volume-filling and quorum sensing in models for chemosensitive movement. *Canadian Appl. Math. Quart.*, 10(4) :501 – 543, 2002.
- [131] C. Patlak. Random walk with persistence and external bias. *The bulletin of mathematical biophysics*, 15(3) :311–338, 1953.
- [132] J. Peeters and P. Eilers. The relationship between light intensity and photosynthesis—a simple mathematical model. *Hydrobiological Bulletin*, 12(2) :134–136, 1978.
- [133] B. Perthame. *Transport equations in biology*. Frontiers in Mathematics. Birkhäuser Verlag, Basel, 2007.
- [134] B. Perthame and A-L. Dalibard. Existence of solutions of the hyperbolic Keller-Segel model. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 361(5) :2319–2335, 2009.
- [135] B. Perthame and C. Simeoni. Convergence of the upwind interface source method for hyperbolic conservation laws. In *Hyperbolic problems : theory, numerics, applications*, pages 61–78. Springer, Berlin, 2003.
- [136] A. Potapov and T. Hillen. Metastability in chemotaxis models. *J. Dyn. Differ. Equations*, 17(2) :293–330, 2005.
- [137] F. Poupaud and J. Soler. Parabolic limit and stability of the Vlasov-Poisson-Fokker-Planck system. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 10 :1027–1045, 2000.
- [138] L. Pratt and R. Kolter. Genetic analysis of *Escherichia coli* biofilm formation : roles of flagella, motility, chemotaxis and type i pili. *Molecular microbiology*, 30(2) :285–293, 1998.
- [139] K. Rajagopal and L. Tao. *Mechanics of mixtures*. World scientific, 1995.
- [140] G. Rein. Non-linear stability of gaseous stars. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 168(2) :115–130, 2003.
- [141] P. Roe. Upwind differencing schemes for hyperbolic conservation laws with source term. In *Nonlinear Hyperbolic Problems*, pages 41–51. C. Carasso, P. A. Raviart, and D. Serre, eds., Lecture Notes in Math. 1270, Springer, Berlin, 1987.
- [142] N. Saito and T. Suzuki. Notes on finite difference schemes to a parabolic-elliptic system modelling chemotaxis. *Appl. Math. Comput.*, 171(1) :72–90, 2005.
- [143] R. Schaaf. Stationary solutions of chemotaxis systems. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 292(2) :531–556, 1985.
- [144] J. Schmidt, M. Müsken, T. Becker, Z. Magnowska, D. Bertinetti, S. Möller, B. Zimmermann, F. Herberg, L. Jänsch, and S. Häussler. The *Pseudomonas aeruginosa* chemotaxis methyltransferase CheR1 impacts on bacterial surface sampling. *PloS one*, 6(3) :e18184, 2011.
- [145] M. Scianna, C. Bell, and L. Preziosi. A review of mathematical models for the formation of vascular networks. *J. Theoret. Biol.*, 333 :174–209, 2013.
- [146] L. Segel. A theoretical study of receptor mechanisms in bacterial chemotaxis. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 32(3) :653–665, 1977.
- [147] G. Serini, D. Ambrosi, E. Giraudo, A. Gamba, L. Preziosi, and F. Bussolino. Modeling the early stages of vascular network assembly. *The EMBO Journal*, 22(8) :1771–1779, 2003.
- [148] M. Short, A. Bertozzi, and P. Brantingham. Nonlinear patterns in urban crime : hotspots, bifurcations, and suppression. *SIAM J. Appl. Dyn. Syst.*, 9(2) :462–483, 2010.
- [149] M. Short, P. Brantingham, A. Bertozzi, and G. Tita. Dissipation and displacement of hotspots in reaction-diffusion models of crime. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 107(9) :3961–3965, 2010.

- [150] M. Short, M. D’Orsogna, V. Pasour, G. Tita, P. Brantingham, A. Bertozzi, and L. Chayes. A statistical model of criminal behavior. *Math. Models Methods Appl. Sci.*, 18 :1249–1267, 2008.
- [151] C. Spadaccio, A. Rainer, S. De Porcellinis, M. Centola, F. De Marco, M. Chello, M. Trombetta, and J.A. Genovese. A G-CSF functionalized PLLA scaffold for wound repair : An in vitro preliminary study. In *Engineering in Medicine and Biology Society (EMBC), 2010 Annual International Conference of the IEEE*, pages 843–846, Aug 2010.
- [152] M. Stomp, J. Huisman, L. Stal, and H. Matthijs. Colorful niches of phototrophic microorganisms shaped by vibrations of the water molecule. *The ISME journal*, 1(4) :271–282, 2007.
- [153] D. Stroock. Some stochastic processes which arise from a model of the motion of a bacterium. *Z. Wahrscheinlichkeitstheorie und Verw. Gebiete*, 28 :303–315, 1973/74.
- [154] R. Temam. Une méthode d’approximation de la solution des équations de Navier-Stokes. *Bull. Soc. Math. France*, 96 :115–152, 1968.
- [155] J. Thébault and S. Rabouille. Comparison between two mathematical formulations of the phytoplankton specific growth rate as a function of light and temperature, in two simulation models (Aster & Yoyo). *Ecological modelling*, 163(1) :145–151, 2003.
- [156] C. Topaz, A. Bertozzi, and M. Lewis. A nonlocal continuum model for biological aggregation. *Bull. Math. Biol.*, 68(7) :1601–1623, 2006.
- [157] M. Twarogowska. *Numerical approximation and analysis of mathematical models arising in cells movement*. PhD thesis, Università degli studi dell’Aquila, 2012.
- [158] Y. Tyutyunov, L. Titova, and R. Arditi. A minimal model of pursuit-evasion in a predator-prey system. *Math. Model. Nat. Phenom.*, 2(4) :122–134, 2007.
- [159] J. Valein and E. Zuazua. Stabilization of the wave equation on 1-D networks. *SIAM J. Control Optim.*, 48(4) :2771–2797, 2009.
- [160] E. van der Grinten, A. Janssen, K. de Mutsert, C. Barranguet, and W. Admiraal. Temperature-and light-dependent performance of the cyanobacterium *Leptolyngbya foveolarum* and the diatom *Nitzschia perminuta* in mixed biofilms. *Hydrobiologia*, 548(1) :267–278, 2005.
- [161] N. Vauchelet. Numerical simulation of a kinetic model for chemotaxis. *Kinet. Relat. Models*, 3(3) :501–528, 2010.
- [162] O. Wanner and W. Gujer. A multispecies biofilm model. *Biotechnology and bioengineering*, 28(3) :314–328, 1986.
- [163] J. Ward and J. King. Thin-film modelling of biofilm growth and quorum sensing. *J. Engrg. Math.*, 73 :71–92, 2012.
- [164] J. Wilking, T. Angelini, A. Seminara, M. Brenner, and D. Weitz. Biofilms as complex fluids. *MRS bulletin*, 36(05) :385–391, 2011.
- [165] T. Zhang, N. Cogan, and Q. Wang. Phase field models for biofilms. I. Theory and one-dimensional simulations. *SIAM J. Appl. Math.*, 69(3) :641–669, 2008.
- [166] T. Zhang, N. Cogan, and Q. Wang. Phase field models for biofilms. ii. 2-d numerical simulations of biofilm-flow interaction. *Commun. Comput. Phys*, 4(1) :72–101, 2008.
- [167] B. Zippel, J. Rijstenbil, and T. Neu. A flow-lane incubator for studying freshwater and marine phototrophic biofilms. *Journal of microbiological methods*, 70(2) :336–345, 2007.